ランダウ＝リフシッツ理論物理学教程

量　子　力　学

＝非相対論的理論＝

改訂増補第３版

1

レフ・ダビドヴィチ・ランダウ　著
エフゲニイ・ミハイロヴィチ・リフシッツ
レフ・ペトロヴィチ・ピタエフスキー　改訂増補協力
佐々木　健　訳
好村滋洋

〔改訂新版〕

東京図書株式会社

Лев Давыдович Ландау
Евгений Михайлович Лифшиц
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
нерелятивистская теория
издание 3-е
переработанное и дополненное
при участии Л. П. Питаевского

第3版への序言

本巻の第2版は，私の師エリ・デ・ランダウと私が共同で執筆した最後の書物となってしまった．そのときは，全章にわたってきわめて大幅な書き換えと題材の追加を行なった．

当然ながら，この新しい第3版では，書き換えを必要とする個所はずっと少なかった．しかし，新しい題材の方はかなりの量を追加してある（その中には，問題の形を借りたものもある）．それには，最新の研究成果だけでなく，旧い研究成果ではあるが，最近注目を浴びるようになったものも含まれている．

ランダウは，理論物理学の方法を自由に使いこなす稀有の才能に恵まれ，ほとんどどんな場合にも，原論文を参照せずに，自分のやり方で必要な結果を再現することができた．だがこのことは，いくつかの必要な引用を，この本から落としてしまう原因にもなっていた．私は，この版ではできる限り，それを補うように努めた．それと同時に，これまでに独立した形では世に出たことのないランダウ自身による結果と方法を説明してある個所では，努めて彼自身の名前を引用するようにした．

この教程の他の巻の改訂作業の場合と同様に，数多くの友人から，まえの記述中の説明不足や，新しい追加の希望について御指摘を受けて助けられることが多かった．ア・エム・ブロトスキー，ゲ・エフ・ドルカレフ，イ・ゲ・カプラン，ヴェ・ペ・クライノフ，イ・ベ・レヴィンソン，ペ・エ・ネミロフスキー，ヴェ・エリ・パクロフスキー，イ・イ・ソベルマン，イ・エス・シャピロの各氏からの多くの有益な御指摘は，この版で採用させていただいた．これらの諸氏に対して心からお礼を申し上げたい．

この巻の新版のためのすべての作業を，私はエリ・ペ・ピタエフスキーの緊密な協力を得ながら行なった．私は彼の中に同じランダウ・スクールに学び，

同じ科学的理想に燃える研究上の協力者を見出して幸運であった.

ソビエト科学アカデミー・物理問題研究所

モスクワ　1973年11月

イェ・エム・リフシッツ

第1版への序言より

理論物理学教程の本巻は量子力学の記述にあてられている．これに関連した題材が非常に大きな分量になることを考慮して，本巻は適当に二つの部分に分けることにした．ここに出版する第一の部分は非相対論的理論を含み，相対論的理論が第二の部分の内容をなしている．

相対論的理論とは，もっとも広い意味に解して，本質的に光速度に依存するあらゆる量子的現象の理論をさしている．そのことに相応して，相対論的理論にはディラックの相対論的理論とそれに関連した問題のみならず，放射のあらゆる量子論をも含んでいる．

本書では量子力学の基礎とともに数多くの応用が，量子力学の一般的教科書よりもずっと大きな比重で述べられている．ただし，研究に際して同時に実験データの詳しい分析が本質的に必要となるような問題だけはどうしても本書の枠を越えるので考察から省くことにした．

われわれは具体的問題の記述には完璧を期した．したがって原論文を引用するのはよけいなことと考えて，その著者だけを示すことにした．

前巻と同様に一般的問題の記述ではできるだけ理論の物理的本質を明らかにするように，またその基礎の上に数学的方法を築くように努めた．これは特に本書のはじめの量子力学的演算子の一般性質の解説に当てられた節でいえることである．通常行なわれているような線形演算子の数学的理論から出発する説明の仕方とは反対にわれわれは物理的な問題提起から出発して，演算子と固有関数に課せられる数学上の要請を導いている．

多くの量子力学の教科書では記述が原論文に比べて著しく複雑化しているといわざるを得ない．ふつう，このような複雑化は一般性と厳密性によって補われるものだが，よく注意してみるとすぐ指摘できるように，実はそれがいずれも《厳密な》定理の肝心の部分が誤りという程度にまで，しばしばこけおどし

なのである．われわれにはこのような記述の複雑化は全く容認できないように思えるので，逆にできるだけ簡単であるように努め，多くの場合に原論文に帰ることにした．

いくつかの純数学的知識は《数学的補遺》の形で巻末にもっていった．これは純粋に計算だけの脇道にそれて本文の説明が中断されることをできるだけさけるためである．またこの補遺は便覧的役割をも兼ねるように考えてある．

モスクワ，1947年5月

エリ・デ・ランダウ

イェ・エム・リフシッツ

第1巻の目次

第3章　シュレーディンガー方程式

第4章　角 運 動 量

第5章　中心対称場の中の運動

第6章　摂　動　論

第10章　原　　子

数学的補遺

第2巻の目次

記　号　例

演算子は山印の記号によってあらわされる：$\hat{f}$

体積要素：座標空間 dV，配置空間 dq，運動量空間 d^3p

物理量 f の行列要素（37 頁の定義参照）　f_{nm} または $\langle n|f|m\rangle$

遷移振動数 $\omega_{nm}=(E_n-E_m)/\hbar$

2 個の演算子の交換子 $\{\hat{f},\hat{g}\}=\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}$

ハミルトニアン　$\hat{H}$

波動関数の位相のずれ　δ_l

原子単位およびクーロン単位については 139 頁の定義を見よ．

ベクトルおよびテンソルの添字はラテン文字 i, k, l を用いてあらわす．

反対称単位テンソル e_{ikl}（99 頁の定義）

本教程の他の巻の節や公式の番号の引用にはローマ数字を用いる：

Ⅰ——第 1 巻『力学』1973 年

Ⅱ——第 2 巻『場の古典論』1973 年

Ⅳ——第 4 巻『相対論的量子力学』1968 年

第1章　量子力学の基本概念

§1. 不確定性原理

古典力学および電気力学を原子的現象に適用しようと試みると，実験とは鋭く矛盾する結果におちいる．このことがもっともはっきりと見られるのは，電子が核のまわりを古典的な軌道を描いて運動している原子模型に，ふつうの電気力学を適用した場合に見られる矛盾である．このような運動では，電荷のあらゆる加速度運動の場合にそうであるように，電子はたえず電磁波を放射しなければならない．電子は電磁波を放射しながら自分のエネルギーを失うので，終りには核に落ち込んでしまうはずである．このようなわけで，古典電気力学に従えば，原子は不安定となるだろう．このことはまったく現実と一致しない．

理論と実験のこの深刻な矛盾はつぎのことを意味している．すなわち，原子的現象——ひじょうに狭い空間領域でひじょうに小さい質量をもった粒子について起こる現象——に適用できる理論をつくるためには，基本的な古典的概念および法則を根本的に変更することが要求される．

この変更を解明するための出発点としては，いわゆる電子回折[1]の実験で観測される現象から話をはじめるのがてきとうであろう．一様な電子束が結晶を通過すると，通過した電子束には強度の極大と極小が交互に並んだ像があらわれるが，これは電磁波の回折の際に観測される回折像と非常によく似ている．したがって，「ある条件の下では物質粒子——電子——の振舞いは，波動的過程に特有な性質を示す」のである．

この現象が運動に関するふつうの考え方といかに深刻に矛盾するかは，結晶

1)　電子回折の現象は実際には量子力学の成立後に発見されている．しかしわれわれの説明では，理論の発展の歴史的順序にこだわらずに，量子力学の基本的原理と実験で観測される現象との関連を，もっとも明瞭に示すことができるように理論を構成することを試みよう．

による電子回折の実験を理想化したつぎのような思考実験を扱うのがもっともわかりやすい．電子が透過できないスクリーンを考え，これに二つのスリットがあいているとしよう．第2のスリットを閉じたときに，第1のスリットを通過する電子束[1]を観測すると，スリットの向こう側に置かれた平らなスクリーン上に，ある強度分布をもった像が得られる．また同じようにして，第2のスリットを開き，第1のスリットを閉じれば，別の像が得られる．つぎに同時に二つのスリットを通過する電子束を観測すると，ふつうの考え方から当然期待されるのは，上述の二つの像を単純に重ねあわせた像である．すなわち，各電子はそれ自身の軌道を運動して，スリットのどちらか一方を通過し，他方のスリットを通過する電子には何の影響もおよぼさないことが期待される．しかしながら，電子回折の現象では，現実には回折像が得られることを示している．これは，干渉効果のためにそれぞれのスリットによって別々につくられる像の和に帰することがまったくできないような像である．この結果と軌道に沿った電子の運動という概念を両立させることは，とうてい不可能なことは明らかである．

したがって，原子的現象を支配する力学――いわゆる**量子力学**あるいは**波動力学**――は，古典力学と根本的に異なる運動の描像に基づいて建設されなければならない．量子力学においては粒子の軌道という概念は存在しない．このことがいわゆる**不確定性原理**の内容である．――これは量子力学の基本原理の一つであって，ハイゼンベルグ（W. Heisenberg, 1927）[2] によって発見された．

不確定性原理はいうなれば古典力学のふつうの描像を否定するという消極的な内容をもっている．当然この原理だけでは，それに基づいて粒子の新しい力学を組み立てるのには不十分である．このような理論の基礎には，もちろん何らかの積極的な主張が存在しなければならない．これについてはあと（§2）で述べることにする．しかし，このような主張を定式化するためには，量子力学の直面する問題の本質をあらかじめ明らかにしておくことが必要である．その

1）電子束は十分に希薄であって，その中での粒子の相互作用は何の役割も果たしていないと仮定している．

2）次のことを指摘しておくのは興味深いことであろう．すなわち，量子力学の完全な数学的定式化は1925年から1926年にかけてW.ハイゼンベルグとE.シュレーディンガーによってなされたが，それはこの定式の物理的内容を明らかにした不確定性原理の発見以前のことであった．

てはじめに，量子力学と古典力学との相互関係の特徴を検討することにしよう．

より一般的な理論は，その極限の場合であるような一般的でない理論とは独立に，理論的に閉じた形で定式化されるのがふつうである．たとえば，相対論的力学はニュートン力学を全然引用することなく自己の基本原理に基づいて組み立てられる．ところが量子力学の基本的な命題を定式化することは，古典力学を用いないでは原理的に不可能である．

電子[1]が定まった軌道をもたないことは，それ自身から他のあらゆる力学的特徴[2]までも奪ってしまう．したがって明らかに，量子的対象のみからなる系では理論的に閉じたいかなる力学を建設することも一般に不可能である．電子の運動の定量的記述が可能であるためには，十分な精度で古典力学に従う物理的対象が別に存在することが必要である．もしも電子が《古典的対象》と相互作用するならば，一般的にいって後者の状態は変化する．この変化の性質および大きさは電子の状態に依存するので，電子の状態の定量的特徴づけに役立たせることができる．

このようなわけで《古典的対象》はふつう《測定器》と呼ばれ，これが電子と相互作用する過程を《測定》という．しかし，ここではけっして物理学者——観測者——の参与する《測定》の過程のことを考えているのではないことを強調しておかなければならない．量子力学における測定とは，いかなる観測者とも別に，独立に行なわれる古典的対象と量子的対象との相互作用のあらゆる過程である．量子力学における測定の概念の重要な役割はボーア (N. Bohr) によって解明された．

われわれは，十分な精度をもって古典力学に従う物理的対象を測定器の定義とした．このようなものは，たとえば，十分に大きな質量をもつ物体である．しかし巨視的であることが測定器の必要条件であると考えてはならない．ある条件の下では微視的な対象もまた測定器の役割を果たすことができる．なぜなら《十分な精度で》という概念は具体的に出された問題に依存するからであ

---

1) この節および以下の節において，簡単のために電子と呼んで，一般に任意の量子的な対象，すなわち量子力学に従って古典力学に従わない粒子または粒子系を考えることにしよう．

2) 電子の運動を特徴づける量を指しており，粒子としての電子を特徴づける量（電荷，質量）ではない．これらはパラメーターである．

る．たとえば，ウィルソンの霧箱の中では電子の運動は電子の残した霧の飛跡として観測される．その飛跡の幅は原子の寸法にくらべてずっと大きい．このような精度で軌道を決める場合，電子はまったく古典的な対象である．

したがって，量子力学は物理学の諸理論の中でもひじょうに変わった位置を占めている．すなわち量子力学は古典力学をその極限の場合として含み，またそれと同時にこの極限の場合をそれ自身の基礎づけのために必要とする．

ここまでくれば，われわれは量子力学の課題を定式化することができる．典型的な課題は，すでに行なった結果を知って，次の測定結果を予言することである．さらにあとで見るように，量子力学では，一般的にいって，古典力学にくらべていろいろな物理量（たとえばエネルギー）のとり得る値，すなわち，ある量を測定したときに得られる値の集合が制限されている．量子力学の方法はこれらの許される値を決定できるものでなくてはならない．

量子力学では測定の過程はひじょうに重要な特徴をもっている．――測定の過程はつねに測定をうける電子に作用をおよぼす．そして測定精度を決めると，この作用を任意に弱くすることは原理的に不可能である．測定の精度が高いほど，電子におよぼす作用は強く，ひじょうに低い精度の測定においてのみ，測定対象に対する作用を弱くすることができる．このような測定の性質はつぎのこと，すなわち電子の力学的特徴は，それを測定してはじめて発現するという事実と論理的に関連している．明らかに，もしも測定の過程が対象におよぼす作用を任意に小さくすることができるならば，これは測定される量が，それ自身測定とは無関係の確定値をとることを意味している．

いろいろな種類の測定のうちで，基本的な役割を果たすものは電子の座標の測定である．電子座標の測定は，量子力学の適用範囲内であればいつでも，任意の精度で行なう[1]ことができる．

一定の時間間隔 Δt をおいて，電子の座標の測定をつぎつぎと行なったとしよう．その結果は，一般的にいって，どんななめらかな曲線にも乗らない．反対に，測定を正確に行なえば行なうほど，その結果はますますとびとびになり，無秩序な傾向を示す．このことは電子にとって軌道の概念が存在しないこ

---

1)《測定を行なう》といった場合，電子が古典的な《測定器》と相互作用することを考えているのであって，局外の観測者の存在を想定しているのではないことを，もう一度強調しておく．

とに対応している．どうにかなめらかな軌道が得られるのは，低い精度で電子の座標を測定した場合のみであって，ウィルソンの霧箱で液滴が凝縮するのはその一例である．

もしも，測定精度を一定にしたまま，測定と測定の間隔 Δt を短くすると，相隣る測定からはもちろん接近した座標の値が得られる．しかしながら，一連の測定の結果は，空間の狭い範囲に落ちるとしても，この範囲内ではまったく無秩序に分布しており，けっしてなめらかな曲線には乗らないであろう．とくに Δt をゼロにもっていっても，近接する測定の結果が，一直線に乗ることはありえない．

この最後の事情が示すように，量子力学には古典的な言葉の意味での粒子の速度という概念，すなわち二つの時刻における座標の差をこれらの時刻の間隔 Δt で割った値が収束する極限としての速度は存在しない．しかしあとで見るように，量子力学でも，古典力学へ移行すれば古典的速度になるような，ある時刻における粒子の速度というものを合理的に定義することができる．

古典力学では，粒子は各時刻に確定した座標と速度をもっているが，量子力学では事情はまったく異なっている．もしも測定の結果電子が確定した座標を得たとすると，このときこの電子は一般にいかなる確定した速度ももっていない．反対に，確定した速度をもつと，その電子は空間において確定した位置をもつことができない．実際，任意の時刻に座標と速度が同時に存在することは，確定した軌道が存在することを意味するが，電子はこのようなものをもっていない．したがって，量子力学では電子の座標と速度は同時に正確に測定することができない量，すなわち同時に確定した値をもつことができない量である．電子の座標と速度は同時には存在することのない量であるということができる．以下において，座標と速度を精度は悪いが同一時刻に測定する可能性を与える定量的関係を導こう．

古典力学では物理体系の状態を完全に記述するには，与えられた時刻において系のすべての座標と速度を定めればよい．運動方程式は，これらの初期条件によって未来のすべての時刻における系の状態を完全に決定する．量子力学では，座標とそれに対応する速度が同時に存在しないため，このような記述は原理的に不可能である．したがって，量子系の状態の記述は，古典力学における

よりも少ない数の量によってなされる，すなわち古典力学の場合ほどくわしくはない．

このことから，量子力学で行なう予測というものの性質に関してひじょうに重要な結論がでてくる．古典的記述は，力学系の未来の運動を完全に正確に予測するのに十分であるのに反し，詳しさの劣る量子力学的記述はそれには不十分である．この意味は，たとえ電子が量子力学で可能な限り完全に記述された状態にあったとしても，その後の時刻における その振舞いは原理的に一義的でない，ということである．したがって量子力学は，電子の未来の振舞いに関してはっきり定まった予測を行なうことはできない．電子の初期状態を与えても，それに続く測定はさまざまな結果を与え得る．量子力学の課題はただ，この測定によりある結果を得る確率を定めることにある．もちろんある場合には，一定の測定結果がでる確率が1に等しくなること，すなわち確実性に転化することがある．この場合には与えられた測定の結果は一義的である．

量子力学におけるすべての測定過程は二つのカテゴリーに分けることができる．大部分の測定を含む第一のカテゴリーに属するのは，系の状態がいかなるときにも，一義的結果を確実には与えないような測定である．いま一つのカテゴリーに属するのは，測定をすると必ず一定の結果を与えるような状態が，各測定結果に対応して存在するような測定である．**予測可能**と呼ぶことのできる後者の測定こそ，量子力学で基本的な役割を果たすものである．このような測定で決められる状態の定量的特性は，量子力学において物理量と呼んでいるものである．もしもある状態において測定が確実に一義的結果を与えるならば，この状態では対応する物理量は確定値をもつ，ということにしよう．今後は《物理量》という表現をいつもここに述べた意味に理解することにしよう．

以下においてわれわれは，量子力学ではすべての物理量を同時に測定することはできないこと，すなわちそれらが同時に確定値をとることはけっしてないことを再三見るだろう（その一例として，電子の速度と座標のことはすでに述べた）．

量子力学ではつぎのような性質をもつ物理量の組が，重要な役割を果たしている．すなわちこれらの量は同時に測定され，しかもこれらが同時に確定値をもってしまえば，他のいかなる物理量も（それらの関数ではないかぎり）この

状態ではもはや確定値をとることはできないようなものである．このような物理量の組のことを，**完全な組**と呼ぶことにしよう．

電子の状態の記述はすべて，ある測定の結果生ずるものである．ここで，量子力学における状態の完全な記述とはいかなる意味かを定式化しよう．状態の記述は，物理量の完全な組の同時測定の結果完全なものとなる．とくにこのような測定の結果を用いれば，最初の測定までに電子について起こったあらゆることと無関係に，それ以後のあらゆる測定結果の確率を定めることができる．

今後はいつも（ただし§14だけは除く）量子系の状態とは，このように完全に記述された状態のことであると理解することにする．

§ 2. 重ね合わせの原理

量子力学では運動の物理的描像が古典力学にくらべて根本的に変わったので，当然ながら理論の数学的方法も同様に根本的変更を必要とする．この点でまずはじめに問題となるのは量子力学において状態を記述する方法である．量子系の座標をまとめて q とあらわし，これらの座標の微分量の積を dq とあらわすことに約束しよう（これは系の**配位空間**の体積要素と呼ばれる）．一つの粒子に対しては dq はふつうの空間の体積要素 dV と一致する．

量子力学の数学的方法の基礎をなすのは，系の状態が，座標のある関数（一般的にいうと複素関数）$\Psi(q)$ によって記述され，そしてこの関数の絶対値の自乗が座標の値の確率分布を決定するという命題である．すなわち，$|\Psi|^2dq$ は系に対して測定を行なったとき，座標の値が配位空間の要素 dq の中に見いだされる確率をあらわす．関数 Ψ は系の**波動関数**と呼ばれる[1]．

波動関数を知れば，（座標の測定だけでなく）他のあらゆる測定のいろいろな結果の確率まで，原理的には計算することができる．この場合これらの確率はすべて Ψ および Ψ^* に関する双1次形式で定義される．このような形式のもっとも一般的な形は

$$\iint\Psi(q)\Psi^*(q')\varphi(q,q')dqdq' \tag{2.1}$$

である．ここで関数 $\varphi(q,q')$ は測定の種類および結果に依存しており，積分は

1) これは，シュレーディンガー（E. Schrödinger, 1926）によりはじめて量子力学に導入された．

全配位空間にわたって行なわれる．座標がいろいろな値をとる確率それ自身をあらわす $\Psi\Psi^*$ もまたこのような型の表式[1]である．

一般的にいえば時間がたつに従って，系の状態とともに波動関数は変化する．この意味で，波動関数は時間の関数ともみなされる．状態の完全な記述という概念の意味は，もしも波動関数がはじめのある時刻にわかっていたとすると，それ以後のすべての時刻における波動関数も，それによって原理的には定まるということである．波動関数の実際の時間依存性は，あとで導かれる方程式によって決定される．

系の座標がとり得るすべての値の確率の和は，定義により1に等しくなければならない．このため，$|\Psi|^2$ を全配位空間にわたって積分した結果は1に等しくなければならない．すなわち

$$\int|\Psi|^2 dq=1. \tag{2.2}$$

この等式は，波動関数の**規格化条件**と呼ばれるものである．もしも $|\Psi|^2$ の積分が収束するならば，てきとうな定係数を選ぶことにより，いつでも関数 Ψ を文字通り規格化させることができるといえる．しかしながら，あとで見るように，$|\Psi|^2$ の積分は発散することもあり，その場合には Ψ は条件 (2.2) によって規格化できない．このような場合には，$|\Psi|^2$ はもちろん座標の絶対確率を与えず，配位空間の相異なる二点における $|\Psi|^2$ の値の比が，対応する座標値の相対確率を与えるにすぎない．

波動関数を用いて計算される，直接の物理的意味をもつすべての量は (2.1) の形をもつので，すなわち Ψ と Ψ^* は積の形になるので，規格化された波動関数は，明らかに $e^{i\alpha}$ の形をした定数の**位相因子**を除いた精度でしか決められない．ここで α は任意の実数である．この不定性は原理的なものであって，避けることはできない．しかしそれは，いかなる物理的結果にも反映しないので重要ではない．

量子力学の積極的内容の基本をなすのは，波動関数の性質に関する次のような一連の命題である．

波動関数が $\Psi_1(q)$ の状態では，測定を行なうと確実に一定の結果――結果1

1) これは (2.1) で $\varphi(q, q')=\delta(q-q_0)\delta(q'-q_0)$ と置いて得られる．ここで δ は δ-関数と呼ばれるもので，あとの§5で定義される．q_0 は，いま確率を求めている座標の値をあらわす．

——が得られ，波動関数が$\Psi_2(q)$の状態では結果2が得られるとしよう．すると，Ψ_1とΨ_2のあらゆる線形結合，すなわち$c_1\Psi_1+c_2\Psi_2$（c_1, c_2は定数）なる形のすべての関数は，上と同じ測定によって結果1か2のいずれかが得られる状態を記述することになる．さらに，われわれに状態の時間依存性がわかっていて，一つの場合には関数$\Psi_1(q,t)$で与えられ，もう一つの場合には$\Psi_2(q,t)$で与えられるとすれば，それらの任意の線形結合もまた状態の可能な時間依存性を与えるということができる．

この命題が，いわゆる**状態の重ね合わせの原理**の内容である．これは量子力学の積極的な基本原理である．これからとくに，波動関数が満たすあらゆる方程式はΨに関して線形でなければならないとうことが導かれる．

二つの部分からなる系を考えよう．しかもこの系の状態は，各部分だけで完全な記述ができるように，与えられていると仮定しよう[1]．そうすると，第1の部分の座標q_1の確率は第2の部分の座標q_2の確率に依存せず，それゆえ系全体としての確率分布は，系の各部分に対する確率の積に等しくならなければならないことになる．これは，系の波動関数$\Psi_{12}(q_1, q_2)$をつぎのように系の各部分の波動関数$\Psi_1(q_1)$および$\Psi_2(q_2)$の積の形にあらわすことができることを意味している：

$$\Psi_{12}(q_1, q_2)=\Psi_1(q_1)\Psi_2(q_2). \tag{2.3}$$

もしも両部分が互いに相互作用をしなければ，系とその各部分の波動関数の間のこのような関係は，それ以降の時刻にも保存される：

$$\Psi_{12}(q_1, q_2, t)=\Psi_1(q_1, t)\Psi_2(q_2, t). \tag{2.4}$$

§ 3. 演　算　子

量子系の状態を特徴づけるある物理量fを考えよう．厳密にいうと，以下の考察は，一つの量のみではなく，それらの量全部について一括して論ずべきであろう．しかし，これによってすべての議論が本質的に変わるようなことはないので，簡単のために以下ではただ一つの物理量について論ずることにする．

1）もちろん，これによって系の全体としての状態も完全に記述されていることになる．しかし逆の命題はけっして正しくはないことを強調しておこう．全体としての系の状態の完全な記述は，一般には，その各部分の状態を完全には決定しない（§ 14 も参照）．

与えられた物理量がとり得る値は，量子力学ではその**固有値**と呼ばれ，その全体は，その量の固有値の**スペクトル**と呼ばれる．古典力学では，一般的にいって，物理量は連続的な値をとる．量子力学でも，固有値が連続的な一連の値を占めるような物理量が存在する（たとえば座標）．このような場合は，固有値の**連続スペクトル**と呼ばれる．しかし量子力学では，このような量の他に，固有値がある離散的な集合をなすような物理量も存在する．このような場合は，**離散スペクトル**と呼ばれる．

はじめ簡単のため，考える量fは離散スペクトルをもつとしよう．連続スペクトルの場合は本章§5で考察される．量fの固有値をf_nと書くことにする．ここで添字nは$0, 1, 2, 3, \cdots$なる値をとる．さらに量fが値f_nをとる状態にある系の波動関数を，Ψ_nと書くことにする．波動関数Ψ_nは与えられた物理量fの**固有関数**と呼ばれる．これらの関数はいずれも

$$\int|\Psi_n|^2 dq=1 \tag{3.1}$$

のように規格化されているとする．

系が波動関数Ψをもつある任意の状態にあるとすると，その系に対して量fの測定を行なうと，結局，固有値f_nのうちの一つが得られる．重ね合わせの原理に従えば，波動関数Ψは，この状態にある系に対して測定を行なったときに有限な確率で観測される値f_nに対応する固有関数Ψ_nの線形結合であらわされなければならないことになる．したがって，一般の任意の状態の場合には，関数Ψは次の級数の形にあらわすことができる：

$$\Psi=\sum_n a_n\Psi_n. \tag{3.2}$$

ここで和はすべてのnに対してとり，a_nはある定係数である．

したがって，われわれはつぎの結論に達する．すなわち，あらゆる波動関数は任意の物理量の固有関数によって展開することができる．このような展開を行なうことができる関数の系を，**関数の完全系**という．

展開式(3.2)から，系が波動関数Ψの状態にあるとき，(測定によって)量fがf_nという値に見出される確率を決定することができる．実際に，前節で述べたことから，これらの確率はΨおよびΨ^*に関するある双1次形式により定義されなければならず，したがってa_nおよびa_n^*に関しても双1次でなければ

ならない．さらにこれらの表式はもちろん正でなければならない．最後に，値 f_n をとる確率は，系が波動関数 $\Psi=\Psi_n$ の状態にあれば，1となり，また波動関数 Ψ の展開式 (3.2) の中に与えられた Ψ_n の項が存在しなければ，ゼロとならなければならない．この条件を満足するただ一つの正で定符号の量は，係数 a_n の絶対値の自乗である．こうしてつぎの結果に到達する．すなわち展開式 (3.2) の各係数の絶対値の自乗 $|a_n|^2$ は，波動関数が Ψ の状態において量 f が対応する値 f_n をとる確率を決定する．すべての可能な値 f_n の確率の和は1に等しくなければならない．いいかえると次の関係を満たさなければならない：

$$\sum_n |a_n|^2=1. \tag{3.3}$$

もしも関数 Ψ が規格化されていなければ，関係式 (3.3) も成り立たない．この場合には和 $\sum_n |a_n|^2$ は，Ψ と Ψ^* に関する双1次式であって，規格化された Ψ に対しては1となるような式によって定義されなければならない．このようなものは，積分 $\int\Psi\Psi^*dq$ のみである．したがって次の等式が成り立たなければならない：

$$\sum_n a_n a_n^*=\int\Psi\Psi^*dq. \tag{3.4}$$

他方，Ψ に複素共役な関数 Ψ^* の展開式 $\Psi^*=\sum_n a_n^*\Psi_n^*$ を掛けてから，積分すると

$$\int\Psi\Psi^*dq=\sum_n a_n^*\int\Psi_n^*\Psi dq$$

を得る．これを (3.4) と比較すると

$$\sum_n a_n a_n^*=\sum_n a_n^*\int\Psi_n^*\Psi dq$$

となり，これから関数 Ψ の固有関数 Ψ_n による展開の係数 a_n を定める次の公式が導かれる：

$$a_n=\int\Psi\Psi_n^*dq. \tag{3.5}$$

もしもここへ (3.2) を代入すると

$$a_n=\sum_m a_m\int\Psi_m\Psi_n^*dq$$

を得る．これから固有関数は次の条件を満足しなければならないことがわかる：

$$\int \Psi_m \Psi_n^* dq = \delta_{nm}. \tag{3.6}$$

ここで，$n=m$ のとき $\delta_{nm}=1$，$n \neq m$ のとき $\delta_{nm}=0$ である．$m \neq n$ のとき積 $\Psi_m \Psi_n^*$ の積分がゼロになるという事実は，関数 Ψ_n のあいだの**直交性**と呼ばれている．このように固有関数 Ψ_n の全体は，規格化された相互に直交する（または簡単に**規格直交**）関数の完全系を作っている．

与えられた状態における量 f の**平均値** $\bar{f}$ の概念を導入しよう．平均値のふつうの定義に従って，この量のすべての固有値 f_n にそれぞれに対応する確率 $|a_n|^2$ を掛けて加えたものを $\bar{f}$ と定義しよう．

$$\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2. \tag{3.7}$$

関数 Ψ の展開係数ではなく，この関数 Ψ そのものを含む形に $\bar{f}$ を書きあらわそう．(3.7) には積 $a_n a_n^*$ が入っているので，明らかに求める表式は Ψ および Ψ^* に関して双1次でなければならない．ある数学的**演算子**を導入し，これを $\hat{f}$ と書き[1]，次のように定義しよう．まず，関数 Ψ に演算子 $\hat{f}$ を作用した結果を $(\hat{f}\Psi)$ であらわす．そこで複素共役関数 Ψ^* と $(\hat{f}\Psi)$ の積の積分が平均値 $\bar{f}$ に等しくなるように，$\hat{f}$ を定義する．すなわち

$$\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f}\Psi) dq. \tag{3.8}$$

容易にわかるように，一般の場合，演算子 $\hat{f}$ はある線形積分演算子である[2]．実際には，a_n をあらわす式 (3.5) を用いて，平均値の定義式 (3.7) を次の形に書きかえることができる：

$$\bar{f} = \sum_n f_n a_n a_n^* = \int \Psi^* \left(\sum_n a_n f_n \Psi_n\right) dq.$$

(3.8) と比較すれば，関数 Ψ に演算子 $\hat{f}$ を作用させた結果は次の形をもつことがわかる：

$$(\hat{f}\Psi) = \sum_n a_n f_n \Psi_n. \tag{3.9}$$

もしもこれに a_n をあらわす式 (3.5) を代入すると，$\hat{f}$ は次の形の積分演算子であることがわかる：

---

1) われわれはいつも演算子を山印 ^ の記号をつけた文字で記すことにする．

2) 線形とはつぎの性質をもつ演算子のことである．すなわち $\hat{f}(\Psi_1+\Psi_2)=\hat{f}\Psi_1+\hat{f}\Psi_2$, $\hat{f}(a\Psi)=a\hat{f}\Psi$．ここで Ψ_1, Ψ_2 は任意の関数，a は任意の定数である．

$$(\hat{f}\Psi)=\int K(q,q')\Psi(q')dq'. \tag{3.10}$$

ここで関数 $K(q,q')$（いわゆる演算子の核）は

$$K(q,q')=\sum_n f_n\Psi_n^*(q')\Psi_n(q) \tag{3.11}$$

である．

このように量子力学ではあらゆる物理量に一定の線形演算子が対応する．

(3.9) からわかるように，もしも関数 Ψ が固有関数 Ψ_n の一つであったとすると（すなわち一つを除く他のすべての a_n がゼロに等しいとすると），この関数に演算子 $\hat{f}$ を作用した結果は，この関数に対応する固有値 f_n を単に掛けたものになる[1]：

$$\hat{f}\Psi_n=f_n\Psi_n. \tag{3.12}$$

したがって，与えられた物理量 f の固有関数は方程式

$$\hat{f}\Psi=f\Psi$$

の解である．ここで f は定数である．また固有値とは，ここに書かれた方程式が要求された条件を満足する解をもつ場合に，この定数のとる値である．以下に見るように，いろいろな物理量に対する演算子の形は直接の物理的考察から決定することができる．その場合には上に述べた演算子の性質から，方程式 $\hat{f}\Psi=f\Psi$ を解くことにより，固有関数と固有値を求めることが可能になる．

実数の物理量がとり得る値は，明らかに実数である．したがって，その物理量の平均値もあらゆる状態において実数でなければならない．逆に，もしも物理量の平均値があらゆる状態において実数ならば，そのあらゆる固有値も実数である．それには，関数 Ψ_n で記述される状態では，平均値と固有値が一致することを指摘すれば十分である．

平均値が実数であるという事実から，演算子の性質に関してある結論を導くことができる．式 (3.8) とそれに複素共役な式を等しいと置くと，次の関係式を得る．

$$\int\Psi^*(\hat{f}\Psi)dq=\int\Psi(\hat{f}^*\Psi^*)dq. \tag{3.13}$$

---

1) 今後誤解を生ずるおそれがない場合にはいつでも，表式 $(\hat{f}\Psi)$ における括弧を省略することにし，演算子はそのすぐあとに書かれた表式に作用するものと理解する．

ここで $\hat{f}^*$ は $\hat{f}$ の複素共役な演算子をあらわす[1]．任意の線形演算子に対して，このような関係式は一般的には成り立たない．したがって，この式は演算子 $\hat{f}$ の可能な形に対して課せられるある制限をあらわしている．任意の演算子 $\hat{f}$ に対して，その**転置演算子** $\tilde{\hat{f}}$ と呼ばれるものをつぎの定義によってつくることができる：

$$\int\Phi(\hat{f}\Psi)dq=\int\Psi(\tilde{\hat{f}}\Phi)dq. \tag{3.14}$$

ここで Ψ,Φ は二つの異なる関数である．もしも関数 Φ として，Ψ に複素共役な関数 Ψ^* を選ぶと，(3.13) との比較から

$$\tilde{\hat{f}}=\hat{f}^* \tag{3.15}$$

とならなければならないことがわかる．この条件を満足する演算子は**エルミート演算子**[2]と呼ばれる．このようなわけで量子力学の数学的定式において，実数の物理量に対応する演算子はエルミートでなければならない．

形式的には複素数の物理量，すなわちその固有値が複素数であるような物理量を考えることもできる．いま f をこのような量であるとしよう．そうするとそれに複素共役な量，すなわち，その固有値が固有値 f に複素共役であるような量 f^* を導入することができる．量 f^* に対応する演算子を $\hat{f}^+$ と書くことにしよう．これは演算子 $\hat{f}$ に対する**共役演算子**と呼ばれ，一般的には複素共役演算子 $\hat{f}^*$ とは区別されなければならない．実際に，演算子 $\hat{f}^+$ の定義により，ある状態 Ψ における量 f^* の平均値は

$$\bar{f}^*=\int\Psi^*\hat{f}^+\Psi dq$$

である．他方

$$(\bar{f})^*=\left[\int\Psi^*\hat{f}\Psi dq\right]^*=\int\Psi\hat{f}^*\Psi^*dq=\int\Psi^*\tilde{\hat{f}}^*\Psi dq$$

となる．二つの式を等しく置くと

$$\hat{f}^+=\tilde{\hat{f}}^* \tag{3.16}$$

が得られる．これから明らかなように，一般には $\hat{f}^+$ と $\hat{f}^*$ は一致しない．条

---

1) 定義により，もしも演算子 $\hat{f}$ に対して $\hat{f}\psi=\varphi$ が成り立つならば，複素共役演算子 $\hat{f}^*$ とは $\hat{f}^*\psi^*=\varphi^*$ が成り立つような演算子である．

2) (3.10) の形をした線形積分演算子に対しては，エルミート性の条件は，演算子の核が $K(q,q')=K^*(q',q)$ となるべきことを意味している．

件 (3.15) はここで

$$\hat{f}=\hat{f}^{+} \tag{3.17}$$

と書くことができる．つまり実数の物理量の演算子はそれ自身の共役演算子と一致する（それゆえエルミート演算子は**自己共役演算子**とも呼ばれる）．

エルミート演算子の異なる固有値に対応する固有関数のあいだの直交性を直接証明する方法を示そう．f_n, f_m を実数の量 f の二つの異なる固有値であるとし，Ψ_n，Ψ_m をそれに対応する固有関数であるとしよう：

$$\hat{f}\Psi_n=f_n\Psi_n,$$
$$\hat{f}\Psi_m=f_m\Psi_m.$$

これらの等式のうち最初の式の両辺に Ψ_m^* を掛け，第2の式に複素共役な等式の両辺に Ψ_n を掛けてから，これらの積を辺々相引くと

$$\Psi_m^*\hat{f}\Psi_n-\Psi_n\hat{f}^*\Psi_m^*=(f_n-f_m)\Psi_n\Psi_m^*$$

を得る．この式の両辺を q について積分する．$\hat{f}^*=\tilde{\hat{f}}$ なので，(3.14) によりこの式の左辺の積分はゼロとなり，したがって次式を得る．

$$(f_n-f_m)\int\Psi_n\Psi_m^*dq=0.$$

$f_n\neq f_m$ なので，これから，関数 Ψ_n と Ψ_m の求める直交性が導かれる．

われわれはここではずっとただ1個の物理量について語ってきたが，実は本節の始めにも強調したように，同時に測定可能な物理量の完全な組について語るべきであった．その場合には，これらの量 $f, g, \cdots$ の各々にその演算子 $\hat{f}$, $\hat{g}, \cdots$ が対応することになる．また固有関数 Ψ_n はその場合，すべての考えている量が確定値をもつ状態に対応する．すなわち Ψ_n は確定した固有値 f_n, g_n, …の組に対応し，次の連立方程式の共通の解である：

$$\hat{f}\Psi=f\Psi, \quad \hat{g}\Psi=g\Psi, \quad \cdots.$$

§ 4. 演算子の和および積

もしも二つの物理量 f および g に対応する演算子を $\hat{f}$ および $\hat{g}$ とするならば，和 $f+g$ には演算子 $\hat{f}+\hat{g}$ が対応する．しかしながら，量子力学では異なる物理量の和の意味は，これらの量が同時に測定可能であるかないかによってまったく異なる．もしも量 f および g が同時に測定可能であるならば，演算子

$\hat{f}$ および $\hat{g}$ は共通の固有関数をもち，それらは同時に演算子 $\hat{f}+\hat{g}$ の固有関数でもあり，この演算子の固有値は和 f_n+g_n に等しい．

もしも量 f および g が同時に確定値をとることができないときには，それらの和 $f+g$ の意味は大きく制限される．いえることは，任意の状態におけるこの量の平均値が，各成分のそれぞれの平均値の和に等しく，

$$\overline{f+g}=\bar{f}+\bar{g} \tag{4.1}$$

ということだけである．演算子 $\hat{f}+\hat{g}$ の固有値と固有関数についていうと，これらは一般的には量 f および g の固有値，固有関数とはいかなる関係ももたないであろう．明らかに，もしも演算子 $\hat{f}$ および $\hat{g}$ がエルミートであれば，演算子 $\hat{f}+\hat{g}$ もエルミートであり，したがってその固有値も実数であり，それはまたこのようにして定義された新しい量 $f+g$ の固有値にもなっている．

次の定理に注目しよう．f_0 および g_0 を量 f, g の最小の固有値とし，$(f+g)_0$ を量 $f+g$ の最小の固有値としよう．そうすると次のようにいうことができる：

$$(f+g)_0 \geqq f_0+g_0. \tag{4.2}$$

等号が成り立つのは，量 f および g が同時に測定可能な場合である．この証明は，ある量の平均値はいかなる場合にもその最小の固有値よりも大きいか，またはそれに等しいという明らかな事実に基づいている．量 $(f+g)$ が値 $(f+g)_0$ をとる状態では，$(\overline{f+g})=(f+g)_0$ となる．他方 $(\overline{f+g})=\bar{f}+\bar{g}\geqq f_0+g_0$ が成り立つので，不等式 (4.2) が得られる．

ここでもう一度 f および g を，同時に測定可能な量であるとしよう．するとそれらの和の他に，それらの積の概念を導入することができる．それは，その固有値が量 f および g の固有値の積に等しいような量のことである．容易にわかるように，このような量に対応する演算子の作用は，関数に対して最初に一つの演算子が作用し，つぎに順次他の演算子が作用するという性質のものである．このような演算子は数学的には演算子 $\hat{f}$ および $\hat{g}$ の積としてあらわされる．事実，もしも Ψ_n が演算子 $\hat{f}$ および $\hat{g}$ の共通の固有関数であるとすると

$$\hat{f}\hat{g}\Psi_n=\hat{f}(\hat{g}\Psi_n)=\hat{f}g_n\Psi_n=g_n\hat{f}\Psi_n=g_nf_n\Psi_n$$

となる．(記号 $\hat{f}\hat{g}$ は関数 Ψ に対する演算子を意味し，最初に演算子 $\hat{g}$ が関数 Ψ に，つぎに演算子 $\hat{f}$ が関数 $\hat{g}\Psi$ にと順次作用する)．同様に演算子 $\hat{f}\hat{g}$ のか

わりに積の順序が前者と異なる演算子 $\hat{g}\hat{f}$ をとることもできるが，関数 Ψ_n にこれら両演算子を作用させた結果は同じになることは明らかである．ところがあらゆる波動関数 Ψ は，関数 Ψ_n の線形結合の形にあらわすことができるので，このことから任意の関数に対する演算子 $\hat{f}\hat{g}$ および $\hat{g}\hat{f}$ の作用の結果は同じであることがわかる．この事実は記号的な等式の形で $\hat{f}\hat{g}=\hat{g}\hat{f}$ または

$$\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}=0 \tag{4.3}$$

と書くことができる．

このような二つの演算子 $\hat{f}$ および $\hat{g}$ のことを，互いに**可換**であるという．こうしてわれわれは次の重要な結果に到達する：もしも二つの量 f および g が同時に確定値をもつことができるならば，それらの演算子は互いに可換である．

逆の定理も証明することができる（§ 11 を見よ）．すなわち，もしも演算子 $\hat{f}$ および $\hat{g}$ が可換であれば，それらの演算子に対してすべての固有関数を共通に選ぶことができる．このことの物理的な意味は対応する物理量が同時に測定可能であるということである．したがって，演算子の可換性は，物理量が測定可能であるための必要にしてかつ十分な条件である．

演算子の積の特別な場合は，演算子の累乗積である．上に述べたことから，演算子 $\hat{f}^p$（p は整数）の固有値は，演算子 $\hat{f}$ の同じ固有値を p 回累乗したものに等しいと結論することができる．一般に，演算子 $\hat{f}$ の任意の関数 $\varphi(\hat{f})$ は，演算子 $\hat{f}$ の固有値 f の同じ関数 $\varphi(f)$ が固有値となるような演算子として定義することができる．もしも関数 $\varphi(f)$ がテイラー級数に展開できるならば，この展開によって演算子 $\varphi(\hat{f})$ の作用は，いろいろな累乗 $\hat{f}^p$ の作用に帰着することができる．

とくに演算子 $\hat{f}^{-1}$ は $\hat{f}$ の**逆演算子**と呼ばれる．勝手な関数に演算子 $\hat{f}$ および $\hat{f}^{-1}$ を続けて作用させても，結局その関数は変化をうけないことは明らかである．すなわち $\hat{f}\hat{f}^{-1}=\hat{f}^{-1}\hat{f}=1$ である．

もしも量 f および g が同時に測定可能でないならば，それらの積という概念は上に述べたような直接の意味をもたなくなる．このことは，演算子 $\hat{f}\hat{g}$ がこの場合エルミートではないこと，したがって，実数の物理量を対応させることができないことにすでにあらわれている．実際に転置演算子の定義により次の

ように書くことができる：

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int \Psi \hat{f} (\hat{g}\Phi) dq = \int (\hat{g}\Phi)(\tilde{\hat{f}}\Psi) dq.$$

ここで演算子 $\hat{f}$ は関数 Ψ にのみ作用し，演算子 $\hat{g}$ は Φ にのみ作用する．したがって被積分関数は単に二つの関数 $\hat{g}\Phi$ と $\tilde{\hat{f}}\Psi$ の積になっている．ここでもう一度，転置演算子の定義を用いれば，つぎのように書ける：

$$\int \Psi \hat{f} \hat{g} \Phi dq = \int (\tilde{\hat{f}}\Psi)(\hat{g}\Phi) dq = \int \Phi \tilde{\hat{g}} \tilde{\hat{f}} \Psi dq.$$

したがってわれわれは，最初の積分と比較して関数 Ψ と Φ が位置を交換した積分を得た．いいかえると，演算子 $\tilde{\hat{g}}\tilde{\hat{f}}$ は $\hat{f}\hat{g}$ の転置演算子であって，つぎのように書くことができる．

$$\widetilde{\hat{f}\hat{g}} = \tilde{\hat{g}}\tilde{\hat{f}}. \tag{4.4}$$

つまり，積 $\hat{f}\hat{g}$ の転置演算子は，転置された因子演算子の逆順の積である．式(4.4)の両辺の複素共役をとると

$$(\hat{f}\hat{g})^{+} = \hat{g}^{+}\hat{f}^{+} \tag{4.5}$$

であることがわかる．

もしも演算子 $\hat{f}$ および $\hat{g}$ の各々がエルミートであれば，$(\hat{f}\hat{g})^{+} = \hat{g}\hat{f}$ となる．このことから演算子 $\hat{f}\hat{g}$ がエルミートであるのは，因子 $\hat{f}$ および $\hat{g}$ が可換な場合のみであることが導かれる．

二つの可換でないエルミート演算子の積 $\hat{f}\hat{g}$ および $\hat{g}\hat{f}$ から，それらの**対称積**

$$\frac{1}{2}(\hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f}). \tag{4.6}$$

をとって，エルミート演算子をつくることができることに注目しよう．

また容易にわかるように，差 $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$ は《反エルミート》演算子である（すなわちその転置演算子が，その複素共役に逆符号をつけたものに等しいような演算子である）．この差は i を掛けることによりエルミートとすることができる．すなわち

$$i(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}) \tag{4.7}$$

もまたエルミート演算子である．

以下では簡単のために，次のような記号を使っていわゆる演算子の**交換子**を

あらわすことにしよう：

$$\{\hat{f}, \hat{g}\} = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}. \tag{4.8}$$

すると次の関係が成り立つことが容易にわかる：

$$\{\hat{f}\hat{g}, \hat{h}\} = \{\hat{f}, \hat{h}\}\hat{g} + \hat{f}\{\hat{g}, \hat{h}\}. \tag{4.9}$$

たとえ $\{\hat{f}, \hat{h}\}=0$，および $\{\hat{g}, \hat{h}\}=0$ であっても，一般には $\hat{f}$ と $\hat{g}$ が可換であるということにはけっしてならないことに注意しよう．

§ 5. 連続スペクトル

§3および§4で導かれた離散スペクトルの固有関数の性質を記述するすべての関係は，固有値が連続スペクトルをとる場合にも困難なく一般化することができる．

f を連続スペクトルをもつ物理量としよう．その固有値を，f が一連の連続的な値をとることに対応して単に添字のない同じ文字 f であらわすことにし，対応する固有関数を Ψ_f であらわすことにしよう．任意の波動関数 Ψ は，離散スペクトルをもつ量の固有関数によって級数 (3.2) のように展開することができるのと同様に，連続スペクトルをもつ量の固有関数の完全系によって展開することもできる（ただし今度は積分形になる）．このような展開はつぎの形をしている：

$$\Psi(q) = \int a_f \Psi_f(q) df. \tag{5.1}$$

ここで，積分は量 f のとり得る値の全範囲にわたって行なわれる．

離散スペクトルの場合にくらべて，連続スペクトルの固有関数の規格化の問題は複雑である．この場合には関数の絶対値の自乗の積分が1に等しいという要請は，あとで見るように満足されない．そのかわりに関数 Ψ_f を次のように規格化することに目標を置こう．すなわち波動関数 Ψ で記述される状態において，考えている物理量が f から $f+df$ までの与えられた範囲の値をとる確率を $|a_f|^2 df$ であらわすことにする．すべての可能な値 f の確率の和は1に等しくなければならないので，次式を得る：

$$\int |a_f|^2 df = 1 \tag{5.2}$$

(これは離散スペクトルのときの関係 (3.3) に類似している).

式 (3.5) を導いたのとまったく類似の道をたどり，同じ考えを用いれば，一方において

$$\int \Psi \Psi^* dq = \int |a_f|^2 df$$

と書かれ，また他方においては

$$\int \Psi \Psi^* dq = \iint a_f^* \Psi_f^* \Psi \, df \, dq$$

と書かれる.

両式を比較すると，展開係数を決める式

$$a_f = \int \Psi(q) \Psi_f^*(q) dq \tag{5.3}$$

が求められる. これは (3.5) とまったく同じである.

規格化条件を導くために，ここで (5.1) を (5.3) に代入して

$$a_f = \int a_{f'} \left(\int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq \right) df'.$$

この関係式は任意の a_f に対して成り立たなければならない. それゆえ恒等的に満足されなければならない. そのためには，まず第1に積分記号の中の $a_{f'}$ の係数 $\left(\text{すなわち積分} \int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq\right)$ がすべての $f' \neq f$ に対してゼロとなる必要がある. $f' = f$ に対しては，この係数は無限大にならなければならない (さもないと f' に関する積分は単にゼロを与えるだけである). したがって積分 $\int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq$ は差 $f - f'$ の関数であり，これは引数の値がゼロでないときゼロとなり，引数がゼロに等しいときに無限大になる関数である. この関数を $\delta(f'-f)$ であらわすことにしよう：

$$\int \Psi_{f'} \Psi_f^* dq = \delta(f'-f). \tag{5.4}$$

関数 $\delta(f'-f)$ の $f'-f=0$ における無限大へのなり方は，次式が成り立つように決められる：

$$\int \delta(f'-f) a_{f'} df' = a_f.$$

このためには，明らかに

$$\int \delta(f'-f) df' = 1$$

でなければならない．このように定義された関数は **δ-関数**と呼ばれる[1]．それを定義する公式をもう一度書いておこう．それは

$$x \neq 0 \quad \text{のとき} \quad \delta(x)=0, \qquad \delta(0)=\infty. \tag{5.5}$$

しかも

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)dx=1 \tag{5.6}$$

である．積分の下端と上端は，その間に点 $x=0$ を含めば他の任意の値でもよい．もしも $f(x)$ を $x=0$ で連続な関数とすると

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)f(x)dx=f(0) \tag{5.7}$$

となる．この式は次のようにもっと一般的な形に書くことができる：

$$\int\delta(x-a)f(x)dx=f(a). \tag{5.8}$$

ここで積分範囲は点 $x=a$ を含み，$f(x)$ は $x=a$ で連続であるとする．明らかに δ-関数は偶関数である．すなわち

$$\delta(-x)=\delta(x) \tag{5.9}$$

である．最後に

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\alpha x)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(y)\frac{dy}{|\alpha|}=\frac{1}{|\alpha|}$$

と書けるので，

$$\delta(\alpha x)=\frac{1}{|\alpha|}\delta(x) \tag{5.10}$$

と結論してよい．ここで α は任意の定数である．

式 (5.4) は連続スペクトルの固有関数の規格化条件をあらわしている．それは離散スペクトルの条件 (3.6) にかわるものである．$f \neq f'$ のとき関数 Ψ_f と $\Psi_{f'}$ はこれまでと同様に互いに直交していることがわかる．しかし，連続スペクトルの関数の絶対値の自乗 $|\Psi_f|^2$ の積分は発散してしまう．

関数 $\Psi_f(q)$ は (5.4) と類似のもう一つの関係式を満足する．これを導くために (5.3) を (5.1) に代入すると

$$\Psi(q)=\int\Psi(q')\left(\int\Psi_f^*(q')\Psi_f(q)df\right)dq'$$

1) デルタ関数はディラック (P. A. M. Dirac) によって物理学の理論に導入された．

を得る．これからただちに

$$\int \Psi_f^*(q')\Psi_f(q)df=\delta(q-q') \tag{5.11}$$

となるべきことが結論される．もちろん離散スペクトルに対しても類似の関係式を導くことができて，その形は

$$\sum_n \Psi_n^*(q')\Psi_n(q)=\delta(q'-q) \tag{5.12}$$

となる．

公式 (5.1) と (5.4) の対を (5.3) と (5.11) の対とくらべると，次のことがわかる．すなわち前者では，(5.1) に見るように関数 $\Psi(q)$ は関数 $\Psi_f(q)$ によって展開され，その展開係数が a_f になっている．後者では (5.3) に見るように関数 $a_f\equiv a(f)$ は関数 $\Psi_f^*(q)$ によってまったく同じように展開され，その展開係数が $\Psi(q)$ になっている．関数 $a(f)$ は $\Psi(q)$ と同じく系の状態を完全に決定する；$a(f)$ のことを **f–表示**における波動関数と呼ぶことがある（関数 $\Psi(q)$ の方は q–表示の波動関数と呼ばれる）．系の座標が与えられた範囲 dq の中にある確率は $|\Psi(q)|^2$ によって決まるのと同様に，量 f の値が与えられた範囲 df にある確率は $|a(f)|^2$ によって決まる．関数 $\Psi_f(q)$ が，q–表示における量 f の固有関数であるとすれば，複素共役の関数 $\Psi_f^*(q)$ は f–表示における座標 q の固有関数である．

$\varphi(f)$ を量 f のある関数とし，しかも，φ と f が互いに一意的に結ばれているとする．そうすると関数 $\Psi_f(q)$ はいずれも量 φ の固有関数とみなすことができる．しかし，このときにはこれらの関数の規格化を変える必要がある．実際に，量 φ の固有関数 $\Psi_\varphi(q)$ は次の条件

$$\int \Psi_{\varphi(f')}\Psi_{\varphi(f)}^*dq=\delta[\varphi(f')-\varphi(f)]$$

によって規格化されなければならない．他方関数 Ψ_f は条件 (5.4) によって規格化される．δ–関数の括弧内の引数は $f'=f$ のときにゼロとなる．f' が f に近いときには

$$\varphi(f')-\varphi(f)=\frac{d\varphi(f)}{df}(f'-f)$$

となる．したがって (5.10) により

$$\delta[\varphi(f')-\varphi(f)]=\frac{1}{\left|\dfrac{d\varphi(f)}{df}\right|}\delta(f'-f) \tag{5.13}$$

と書くことができる[1]．(5.13) を (5.4) と比較すると，関数 Ψ_φ と Ψ_f は互いに次の関係で結ばれていることがわかる：

$$\Psi_{\varphi(f)}=\frac{1}{\sqrt{\left|\dfrac{d\varphi(f)}{df}\right|}}\Psi_f. \tag{5.14}$$

ある値の範囲では離散スペクトルをとり，また別の範囲では連続スペクトルをとるような物理量が存在する．このような量の固有関数に対しては，もちろん本節および前節で導いたのと同じ関係式がすべて成立する．ただ注意すべき点は，両スペクトルの固有関数を合わせたものが関数の完全系を形成することである．したがって任意の波動関数は，このような量の固有関数によって次のような形に展開される：

$$\Psi(q)=\sum_n a_n\Psi_n(q)+\int a_f\Psi_f(q)df. \tag{5.15}$$

ここで和は離散スペクトルについてとられ，積分は全連続スペクトルについて行なわれる．

座標 q それ自身は，連続スペクトルをもつ量の一例である．容易にわかるように，それに対応する演算子は，単に q を掛けることである．事実，座標がいろいろな値をとる確率は絶対値の自乗 $|\Psi(q)|^2$ により決定されるので，座標の平均値は

$$\bar{q}=\int q|\Psi|^2dq\equiv\int\Psi^*q\Psi dq$$

である．この式を (3.8) の演算子の定義と比較すると，座標演算子は次の形に書くことができる[2]．

$$\hat{q}=q. \tag{5.16}$$

---

1) もっと一般的には，もしも $\varphi(x)$ がある1価関数であるとすると（その逆関数はかならずしも1価関数ではない），次式が成り立つ．

$$\delta[\varphi(x)]=\sum_i\frac{1}{|\varphi'(\alpha_i)|}\delta(x-\alpha_i). \tag{5.13a}$$

ここで α_i は方程式 $\varphi(x)=0$ の根である．

2) 以下では記号を簡単にするために，ある数の掛け算に帰着される演算子は，いつもその量自身の形に書くことにする．

この演算子の固有関数は，当然一般則に従い，方程式 $q\Psi_{q_0}=q_0\Psi_{q_0}$ によって決定されなければならない．ここで q_0 を，変数 q と区別して，そのときどきの座標の具体的数値をあらわすものとする．この等式が満たされるのは $\Psi_{q_0}=0$，あるいは $q=q_0$ のときなので，規格化条件を満足する固有関数は明らかに

$$\Psi_{q_0}=\delta(q-q_0) \tag{5.17}$$

となる[1]．

§6. 古典力学への極限移行

量子力学はそれ自身の中に，ある極限の場合として古典力学を含んでいる．そこでこの極限への移行がどのように行なわれるかという問題が起こる．

量子力学では，電子はその座標のいろいろな値を決定する波動関数によって記述される．この関数についてさしあたりわれわれが知っていることは，それがある線形偏微分方程式の解であるということだけである．ところが古典力学は，電子は運動方程式によって完全に決定される軌道に沿って運動する物質粒子であるとみなされる．量子力学と古典力学との相互関係にある意味で類似の相互関係が，電磁気学では波動光学と幾何光学のあいだに起こっている．波動光学では，電磁波は一定の連立線形微分方程式（マクスウェル方程式）を満足する電場および磁場のベクトルによって記述される．ところが幾何光学では，一定の光路に沿った光の伝播すなわち光線を考察する．このような類似性があるために，量子力学から古典力学への極限移行は，波動光学から幾何光学への移行と同じように行なわれると結論してよい．

後者の極限移行が数学的にはどのように行なわれたか思い出してみよう．（第2巻『場の古典論』§53参照）．いま u を電磁波の場の成分の一つとしよう．それは実数の振幅 a および位相 φ（後者は幾何光学ではアイコナールと呼ばれる）を用いて $u=ae^{i\varphi}$ という形に書くことができる．幾何光学という極限の場合は短波長に対応する．このことを数学的にあらわすと，短い距離の間に φ が大きく変化するということになる．これは位相の絶対値を大きいとみなし

1）任意の関数 Ψ をこの固有関数により展開するときの係数は $a_{q_0}=\int\Psi(q)\delta(q-q_0)dq=\Psi(q_0)$ に等しい．与えられた間隔 dq_0 の中に座標の値がくる確率は $|a_{q_0}|^2dq_0=|\Psi(q_0)|^2dq_0$ に等しいが，これは期待どおりである．

てよいことを意味している.

同様に，古典力学という極限の場合に対応するのは，量子力学において$\Psi=ae^{i\varphi}$なる形の波動関数のaがゆっくり変動し，φが大きい値をとる場合であるという仮定から出発しよう．よく知られているように力学では，粒子の軌道は力学系の作用Sと呼ばれる量を最小にするという変分原理によって決定される（最小作用の原理)．これに対して幾何光学では，光路はいわゆるフェルマーの原理によって決定される．それによると光線の《光路程》，すなわち光路の始めと終わりにおける位相の差は最小にならなければならない．

この類似性から出発すれば次のようにいうことができる．すなわち古典的な極限の場合には波動関数の位相φは，考えている物理系の力学的作用Sに比例しなければならない．すなわち$S=\text{const}\,\varphi$でなければならない．この比例係数は**プランクの定数**と呼ばれ，文字$\hbar$であらわされる[1]．これは（φが無次元なので）作用の次元をもっており

$$\hbar=1.054\times10^{-27}\ \text{erg}\cdot\text{sec}$$

に等しい．

したがって物理系の《ほとんど古典的な》(またはいわゆる**準古典的な**）波動関数は次の形をしている：

$$\Psi=ae^{iS/\hbar}. \tag{6.1}$$

プランクの定数はあらゆる量子的現象において基本的な役割を演ずる．（同じ次元の他の量と比較した場合の）その相対的な大きさが，それぞれの物理系の《量子度》を決めている．量子力学から大きな位相に対応する古典力学への移行は，式の上では$\hbar\to0$の極限への移行として記述される（これは波動光学から幾何光学への移行が，波長がゼロに等しい極限への移行$\lambda\to0$に対応するのと同じである)．

われわれは波動関数の極限の形を明らかにしたが，それが軌道に沿った古典的な運動とどうつながるのかという問題はまだ残されている．一般の場合には，波動関数で記述される運動は，けっして確定した軌道に沿った運動には移

1) これはM.プランクにより物理学に導入された (M. Planck, 1900)．本書のいたるところで用いられている定数$\hbar$は，厳密にいうとプランクの定数hを2πで割ったものである（ディラックの記号)．

行しない．その古典的運動とのつながりは，はじめのある時刻に波動関数ならびに座標の確率分布が与えられれば，以後はこの分布が古典力学の法則に従うように《移動する》という点である（詳細は§17の終わりを見よ）．

確定した軌道に沿った運動を得るためには，空間のひじょうに狭い領域においてのみいちじるしくゼロと異なる特別な形の波動関数（いわゆる**波束**）から出発しなければならない．この領域の大きさは$\hbar$とともにゼロにすることができる．そうすると準古典的な場合には，波束は粒子の古典的な軌道に沿って空間を移動するということができる．

最後に量子力学的演算子は，この極限ではそれらに対応する物理量の単なる掛け算になってしまう．

§7. 波動関数と測定

§1で測定過程の性質の定性的考察を行なったが，ふたたびこの問題に帰って，この性質が量子力学の数学的方法とどのように関連しているかを示そう．

二つの部分——古典的測定器と（量子的対象とみなされる）電子——からなる系を考えよう．測定の過程とは，これらの二つの部分が互いに相互作用をおこすことであり，その結果測定器は最初の状態からある別の状態へ移行し，状態のこの変化に基づいて，われわれは電子の状態を判断する．測定器の状態は，それを特徴づける（1個または数個の）物理量の値——《測定器の指針の読み》——によって区別される．この値をかりにgであらわし，その固有値をg_nであらわすことにしよう．後者は測定器の古典性から，一般に連続的な値をとるが，もっぱら以下に導く式の記述を簡単にするために，離散スペクトルをとるものと考えよう．測定器の状態の記述は準古典的な波動関数によりなされるが，それを$\Phi_n(\xi)$と書くことにしよう．ここで添字nは測定器の《指針》g_nに対応するものであり，ξはここでは測定器の座標の全体をあらわす．測定器の古典性のあらわれとして，われわれは測定器が既知の状態Φ_nの一つにあって，量gがある確定値をとることを，与えられた時刻ごとに正確にいうことができる．量子的な系ではこのような言い方はもちろん通用しない．

$\Phi_0(\xi)$を測定器のはじめの状態（測定以前）の波動関数，$\Psi(q)$をはじめの任意の規格化された電子波動関数であるとしよう（qは電子の座標をあらわす）．

これらの関数は測定器および電子の状態をそれぞれ独立に記述する．したがって全系のはじめの波動関数はこれらの関数の積

$$\Psi(q)\Phi_0(\xi) \tag{7.1}$$

である．つぎに測定器と電子は互いに相互作用をおこす．量子力学の方程式を適用すると，系の波動関数の時間的変化を追跡することが原理的には可能である．測定の過程のあとでは波動関数はもはや ξ の関数と q の関数の積でないことはもちろんである．それを測定器の固有関数 Φ_n で展開すると（これらは関数の完全系を成している），次の形の和を得る：

$$\sum_n A_n(q)\Phi_n(\xi). \tag{7.2}$$

ここで $A_n(q)$ は q のある関数である．

さてここで測定器のもつ《古典性》および古典力学のもつ二重の役割——量子力学の極限としての，また同時に量子力学の基礎としての——が舞台に登場する．すでに述べたように測定器の古典性のために，量 g（測定器の指針）は各時刻にある確定値をとる．このため，測定後の測定器＋電子の系の状態は実際には (7.2) の全和によっては記述されず，測定器の《指針》g_n に対応したただ一つの項

$$A_n(q)\Phi_n(\xi) \tag{7.3}$$

によって記述されるということができる．これから $A_n(q)$ は測定後の電子の波動関数に比例することになる．しかしそれがまだ波動関数そのものではないことは，関数 $A_n(q)$ が規格化されていないことからも明らかである．それは，生ずべき電子状態の性質に関する情報のみならず，測定器に n 番目の《指針》があらわれる確率（それは系のはじめの状態によって決められる）をもその中に含んでいる．

一般的にいえば量子力学の方程式が線形であるために，$A_n(q)$ と電子のはじめの波動関数 $\Psi(q)$ のあいだの関係はある線形積分演算子

$$A_n(q)=\int K_n(q,q')\Psi(q')dq' \tag{7.4}$$

であらわされる．ここで核 $K_n(q,q')$ は与えられた測定の過程を特徴づけるものである．

考えている測定は，その結果として電子の状態の完全な記述がはじめて可能

になるようなものであると仮定する．いいかえると（§1参照），測定によって生じる状態ではすべての量の確率は，（測定）以前の電子の状態には依存すべきでないと考える．これは数学的には，$A_n(q)$ の関数形が測定の過程そのものによって決められて，電子のはじめの波動関数 $\Psi(q)$ にはよるべきでないことを意味する．

したがって A_n は

$$A_n(q)=a_n\varphi_n(q) \tag{7.5}$$

の形をもたねばならない．ここで φ_n はある定まった関数であり，規格化されているものとする．はじめの状態 $\Psi(q)$ に依存するのは定数 a_n だけである．このことに対応して積分関係式 (7.4) の中では核 $K_n(q,q')$ が，q だけの関数と q' だけの関数の積に分解される：

$$K_n(q,q')=\varphi_n(q)\Psi_n^*(q'). \tag{7.6}$$

そうすれば定数 a_n と関数 $\Psi(q)$ との線形の関係は

$$a_n=\int\Psi(q)\Psi_n^*(q)dq \tag{7.7}$$

で与えられる．ここで $\Psi_n(q)$ は測定の過程に依存するある定まった関数である．

関数 $\varphi_n(q)$ は測定後の電子の規格化された波動関数である．したがって理論の数学的定式には，定まった波動関数で記述される電子の状態を測定によって求める可能性が反映されていることがわかる．

もしも与えられた波動関数 $\Psi(q)$ をもつ電子に対して測定がなされると，定数 a_n は簡単な物理的意味をもつ．すなわち一般規則によって $|a_n|^2$ は測定が第 n 番目の結果を与える確率である．すべての結果の確率の和は1であるから

$$\sum_n |a_n|^2=1. \tag{7.8}$$

式 (7.7) および (7.8) が任意の（規格化された）関数 $\Psi(q)$ に対しても成り立つことは，任意の関数 $\Psi(q)$ が関数 $\Psi_n(q)$ によって展開できるという命題と同等である（§3参照）．これは，関数 $\Psi_n(q)$ が完全規格直交関数系をなすことを意味している．

もしも電子のはじめの波動関数が関数 $\Psi_n(q)$ の一つと一致すれば，明らかに対応する定数 a_n は1に等しく，残りはすべてゼロである．いいかえると状態

$\Psi_n(q)$ にある電子に対して測定を行なうと，確実に確定した（第 n 番目の）結果を与える．

関数 $\Psi_n(q)$ の以上のような性質のどれをとっても，それが電子を特徴づけるある物理量（それを f と書く）の固有関数であることを示している．また考えている測定もこの量の測定のことであるといえる．

関数 $\Psi_n(q)$ と関数 $\varphi_n(q)$ が一般には一致しないことはひじように重要である（後者は一般に相互に直交せず，また何らかの演算子の固有関数系でもない）．このことはなによりも量子力学における測定結果には再現性がないことをあらわしている．もしも電子が状態 $\Psi_n(q)$ にあるとすると，その電子に対して行なわれる量 f の測定からは確実に値 f_n がえられる．しかし測定後電子ははじめの状態とは異なる状態 $\varphi_n(q)$ にあり，この状態では量 f はもはや一般にどんな確定値もとることはない．したがって電子に対して最初の測定ののちにすぐ続いて第2の測定を行なっても，f としては最初の測定の結果観測された値とは一致しない値が得られるだろう[1]．最初の測定結果を知って第2の測定結果を予言するためには（確率を計算するという意味で），最初の測定からは測定の結果つくり出された状態の波動関数 $\varphi_n(q)$ をつかみ，第2の測定からは，いまその確率を問題にしている状態の波動関数 $\Psi_n(q)$ をつかむ必要がある．この意味は次のとおりである：第1の測定時刻には $\varphi_n(q)$ であった波動関数 $\varphi_n(q,t)$ を量子力学の方程式から決定する．すると時刻 t に行なわれる第2の測定の結果が第 m 番になる確率は，$\int\varphi_n(q,t)\Psi_m^*(q)dq$ の絶対値の自乗によって与えられる．

量子力学における測定過程は《二面的》性格をもっていることがわかる．それの過去との関係で果たす役割と未来との関係で果たす役割は異なっている．過去との関係では，それは先行する測定によってつくり出された状態から予言されるさまざまな有りうる結果の確率を《確かめる》ことである．ところが未来との関係では，測定は新しい状態をつくり出している（§44参照）．したが

1）しかし測定の非再現性には重要な例外がある．測定が再現される唯一の量は座標である．電子の座標を十分に短い時間の間隔をへて2度測定を行なうと，その値は近いものとなるはずである．もしもそうでないとすると電子は無限大の速度をもつことになってしまう．数学的にはこのことは（非相対論の範囲では），座標のみの関数である電子と測定器との相互作用エネルギーの演算子が電子の座標と可換であることと関連している．

って，測定過程の性質それ自体の中に深刻な不可逆性の根源が宿っている．

この不可逆性は重大な原理的意味をもっている．あとで見るように（§18の終わり参照），量子力学の基本方程式それ自体は時間の符号の反転に関する対称性をもっている．この点では量子力学は古典力学と変わらない．しかし測定過程の不可逆性が量子的現象の中に時間の二つの向きの物理的非同等性をもたらしている．すなわち，未来と過去の間に差異を生じさせているのである．

第2章　エネルギーと運動量

§8. ハミルトニアン

波動関数Ψは，量子力学的な物理系の状態を完全に決定する．これは，ある時刻にこの関数を与えると，一般に量子力学において許される精密度をもって，その時刻の系のすべての性質を記述するだけでなく，それにつづくすべての時刻の系の振舞いまで決定することを意味する．数学的には，このことは各時刻における波動関数の時間微分$\partial\Psi/\partial t$の値が，その時刻の関数Ψの値自身によって決められなければならないということである．またその依存性は，重ね合わせの原理によって線形でなければならない．このような関係の中でもっとも一般的な形は，つぎのように書くことができる：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi. \tag{8.1}$$

ここで，$\hat{H}$はある線形演算子である．また，乗数$i\hbar$を導入した目的は以下で説明する．積分$\int\Psi^*\Psi\,dq$は，時間によらない定数であるから

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi|^2dq=\int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\,dq+\int\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}dq=0$$

である．ここに(8.1)を代入し，第1の積分の中で転置演算子の定義を用いれば，(共通の乗数$i/\hbar$を除いて)：

$$\int\Psi\hat{H}^*\Psi^*dq-\int\Psi^*\hat{H}\Psi\,dq=\int\Psi^*\tilde{\hat{H}}^*\Psi\,dq-\int\Psi^*\hat{H}\Psi\,dq$$
$$=\int\Psi^*(\tilde{\hat{H}}^*-\hat{H})\Psi\,dq=0.$$

この等式は任意の関数Ψに対して満たされなければならないから，恒等的に$\hat{H}^+=\hat{H}$，すなわち演算子$\hat{H}$はエルミートでなければならない．これがいかなる物理量に対応するかを調べてみよう．そのために波動関数の極限の表式(6.1)を用いて

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\Psi$$

と書こう(ゆっくり変化する振幅 a は微分しないでよい). この等式と定義 (8.1) を比較すれば, 演算子 $\hat{H}$ は極限の場合に量 $-\partial S/\partial t$ の単なる掛け算になることがわかる. このことは, この量がエルミート演算子 $\hat{H}$ の移行すべき物理量であることを意味する.

微分 $-\partial S/\partial t$ は力学系のハミルトン関数 H に他ならない. したがって演算子 $\hat{H}$ は量子力学においてハミルトン関数に対応する演算子である. これを系の**ハミルトン演算子**あるいは簡単に**ハミルトニアン**と呼ぼう. もしもハミルトニアンの形がわかれば, 方程式 (8.1) はその物理系の波動関数を決定する. この量子力学の基本方程式は, **波動方程式**と呼ばれる.

§ 9. 演算子の時間微分

量子力学における物理量の時間微分という概念は, 古典力学と同じ意味には定義することができない. 古典力学における微分の定義は, 近接しているが異なった二つの時刻における物理量の値を定めることと関連しているが, 量子力学ではある時刻に確定した値をとる量は, それに続く時刻には一般に確定したいかなる値もとらないからである. これについての詳しいことは, §1で述べたとおりである.

それゆえ量子力学では, 時間微分の概念は違ったやり方で定義されなければならない. 量 f の微分 $\dot{f}$ は, その平均値が, 平均値 $\bar{f}$ の時間微分に等しいような量として定義するのが自然であろう. したがって, この定義によれば

$$\bar{\dot{f}}=\dot{\bar{f}} \tag{9.1}$$

である.

この定義から出発すれば, 量 $\dot{f}$ に対応する量子力学的演算子 $\hat{\dot{f}}$ の表式を得るのは容易である. すなわち

$$\bar{\dot{f}}=\dot{\bar{f}}=\frac{d}{dt}\int\Psi^*\hat{f}\Psi dq=\int\Psi^*\frac{\partial\hat{f}}{\partial t}\Psi dq+\int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\hat{f}\Psi dq+\int\Psi^*\hat{f}\frac{\partial\Psi}{\partial t}dq$$

となる. 演算子 $\hat{f}$ は時間にパラメーター的に依存することがあり, $\partial\hat{f}/\partial t$ は $\hat{f}$ を時間で微分することによって得られる演算子である. 導関数 $\partial\Psi/\partial t$, $\partial\Psi^*/\partial t$ として式 (8.1) を代入すれば

$$\bar{\dot{f}}=\int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi\, dq+\frac{i}{\hbar}\int (\hat{H}^*\Psi^*)\hat{f}\Psi\, dq-\frac{i}{\hbar}\int \Psi^*\hat{f}(\hat{H}\Psi)dq$$

となる．演算子 $\hat{H}$ はエルミートであるから

$$\int (\hat{H}^*\Psi^*)(\hat{f}\Psi)dq=\int \Psi^*\hat{H}\hat{f}\Psi\, dq.$$

したがって

$$\bar{\dot{f}}=\int \Psi^*\left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{f}-\frac{i}{\hbar}\hat{f}\hat{H}\right)\Psi\, dq$$

となる．

他方，平均値の定義によって $\bar{\dot{f}}=\int \Psi^*\hat{\dot{f}}\Psi\, dq$ となるべきだから，被積分関数の括弧の中にある表式は，明らかに求める演算子 $\hat{\dot{f}}$ である[1]：

$$\hat{\dot{f}}=\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{f}-\hat{f}\hat{H}). \qquad (9.2)$$

もしも演算子 $\hat{f}$ が時間にあらわに依存しなければ，$\hat{\dot{f}}$ は乗数を除いて $\hat{f}$ とハミルトニアンとの交換子に帰着される．

非常に重要な物理量のカテゴリーに，その演算子が時間にあらわに依存せず，しかもハミルトニアンと可換であって，$\hat{\dot{f}}=0$ となるものがある．このような量は**保存量**と呼ばれる．保存量に対しては $\bar{\dot{f}}=\dot{\bar{f}}=0$，すなわち $\bar{f}=\mathrm{const}$ である．いいかえれば，平均値が時間的に一定である．これは，ある状態において量 f が確定値をとれば（すなわち波動関数が演算子 $\hat{f}$ の固有関数であれ

1）古典力学では，系の一般座標 q_i と運動量 p_i の関数である物理量 f の時間についての全導関数は

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+\sum_i\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)$$

である．ハミルトン方程式に従って，$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}$，$\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$ を代入すれば

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+[H,f], \qquad [H,f]\equiv\sum_i\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

が得られる．$[H,f]$ は，量 f と H についてのいわゆるポアッソン括弧である（第 I 巻『力学』§42 参照）．式（9.2）と比較すれば，古典的極限に移行したとき，演算子 $i(\hat{H}\hat{f}-\hat{f}\hat{H})$ は当然第 1 近似でゼロになり，（$\hbar$ についての）次の近似で $\hbar[H,f]$ になることがわかる．この結果は任意の二つの量 f と g についても成立する．すなわち演算子 $i(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f})$ は，極限において量 $\hbar[f,g]$ に移行する．ここで $[f,g]$ はポアッソン括弧

$$[f,g]\equiv\sum_i\left(\frac{\partial g}{\partial q_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}-\frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q_i}\right)$$

である．これは，ハミルトニアンが $\hat{g}$ であるような系をいつでも形式的に考えることができるから当然である．

ば)，その後の時刻にもそれは同じ確定値をとる，ということもできる．

§10. 定常状態

閉じた系（または，変動しない一定の外場の中に置かれた系）のハミルトニアンは時間をあらわに含まない．このような物理系にとってはすべての時刻は同等であるから，これは当然である．他方あらゆる演算子はもちろん自分自身と可換であるから，変動外場の中に置かれていない系ではハミルトン関数は保存する，という結論になる．よく知られているように，保存するハミルトン関数はエネルギーと呼ばれている．だから量子力学におけるエネルギー保存則の意味は，もしもある状態においてエネルギーが確定値をとれば，その値は時間が変わっても一定である，ということになる．

エネルギーが確定値をとる状態は，系の**定常状態**と呼ばれる．それはハミルトン演算子の固有関数，すなわち方程式 $\hat{H}\Psi_n=E_n\Psi_n$ を満足する波動関数 Ψ_n によって記述される．ここで E_n はエネルギーの固有値である．そうであれば関数 Ψ_n に対する波動方程式（8.1）

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_n}{\partial t}=\hat{H}\Psi_n=E_n\Psi_n$$

は，時間についてただちに積分することができて

$$\Psi_n=e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\psi_n(q) \tag{10.1}$$

を与える．ここで ψ_n は座標だけの関数である．定常状態の波動関数の時間依存性はこれで決まった．

小文字 ψ によって，時間因子を除いた定常状態の波動関数をあらわすことにしよう．この関数およびそのエネルギーの固有値は，方程式

$$\hat{H}\psi=E\psi \tag{10.2}$$

によって決定される．

すべての可能な値の中で最低のエネルギー値をもつ定常状態は，系の**基底状態**と呼ばれる．

任意の波動関数 Ψ を定常状態の波動関数で展開すると，つぎの形になる：

$$\Psi=\sum_n a_ne^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\psi_n(q). \tag{10.3}$$

展開係数の絶対値の自乗 $|a_n|^2$ は，いつものように，系がいろいろなエネルギーをとる確率を定める．

定常状態における座標の確率分布は絶対値の自乗 $|\Psi_n|^2=|\psi_n|^2$ によって決められる．それが時間に依存しないことは明らかである．同じことは，（演算子が時間にあらわに依存しないような）あらゆる物理量 f の平均値

$$\bar{f}=\int\Psi_n^*\hat{f}\Psi_n dq=\int\psi_n^*\hat{f}\psi_n dq$$

についてもいえる．

上述のように，あらゆる保存量の演算子はハミルトニアンと可換である．これは，あらゆる保存物理量はエネルギーと同時に測定することができる，ということを意味する．

いろいろな定常状態の中には，同じエネルギー固有値（いわゆる系の**エネルギー準位**）に属しながら，他の物理量の値では異なっている，というようなものがある．このように異なったいくつかの定常状態が属する準位のことを**縮退準位**という．物理的に縮退準位の存在が可能なのは，エネルギーが一般にはそれだけでは物理量の完全系をなしていないからである．

もしも，二つの保存物理量 f と g があって，その演算子が交換しなければ，系のエネルギー準位は一般に縮退する．たとえば，エネルギーとともに量 f が確定値をとるような定常状態の波動関数を ψ としよう．そのとき，関数 $\hat{g}\psi$ は ψ とは一致しないということができる（定乗数だけが異なるものは一致とする）．もしも一致すれば，g も確定値をとることになるが，f と g が同時に測れない以上それは不可能である．他方，関数 $\hat{g}\psi$ は ψ と同じエネルギーの値 E に属する固有関数である：

$$\hat{H}(\hat{g}\psi)=\hat{g}\hat{H}\psi=E(\hat{g}\psi).$$

したがって，エネルギー E に属する固有関数は1個ではなく，エネルギー準位は縮退していることがわかる．

明らかに，縮退した同じエネルギー準位に属する波動関数の任意の線形結合も，やはり同じエネルギー値の固有関数である．いいかえれば，縮退したエネルギー値の固有関数は，選び方が一意的でない．縮退した準位の任意に選んだ固有関数は，一般には互いに直交しない．しかしその線形結合をてきとうに選

ぶことによって，互いに直交した（さらに規格化された）固有関数の組をいつでもつくることができる[1]．

上述のことは，縮退したエネルギー準位の固有関数だけでなく，あらゆる演算子の固有関数についていえることである．自動的に直交しているのは，ある演算子の異なる固有値に属する関数だけであり，縮退した同じ固有値に属する関数は一般に直交しない．

もしも系のハミルトニアンが二つ（あるいは数個）の部分の和 $\hat{H}=\hat{H}_1+\hat{H}_2$ からなり，その中の一方は座標 q_1 だけを含み，他方は座標 q_2 だけを含むならば，演算子 $\hat{H}$ の固有関数は，演算子 $\hat{H}_1$ と $\hat{H}_2$ の固有関数の積の形に書きあらわされ，エネルギー固有値は各演算子の固有値の和に等しい．

エネルギー固有値のスペクトルは離散的なこともあるし連続的なこともある．離散スペクトルの定常状態には，いつも系の**有界な**運動が対応している．すなわち，系あるいは系の一部が無限遠まで行ってしまわない運動が対応している．実際，離散スペクトルの固有関数では，全空間で行なった積分 $\int|\Psi|^2dq$ が有限となる．このことはいずれにしても絶対値の自乗 $|\Psi|^2$ が十分にはやく減少して無限遠でゼロになることを意味する．いいかえれば，座標が無限大をとる確率はゼロに等しい，ということである．すなわち，系は有界な運動を行ない，いわゆる**束縛状態**にある．

連続スペクトルの波動関数では，積分 $\int|\Psi|^2dq$ は発散する．この場合は波動関数の絶対値の自乗 $|\Psi|^2$ は，座標がある値をとる確率という定義にはすぐにはならず，単にこの確率に比例する量と考えるべきである．積分 $\int|\Psi|^2dq$ の発散は，いつも $|\Psi|^2$ が無限遠でゼロにならないこと（あるいは十分すみやかにゼロにならないこと）と関連して起こる．したがって，任意に大きくとった有限な閉曲面より外側の領域で行なった積分 $\int|\Psi|^2dq$ はすべて発散する．これは，その状態では系（あるいはその一部）は無限遠にも存在していることを意味する．連続スペクトルをもつ多くの定常状態の波動関数の重ね合わせであらわされる波動関数では，積分 $\int|\Psi|^2dq$ が収束して，空間の有限領域におさまる

1）しかもその選び方は無数にある．それは n 個の関数の1次変換の独立な係数の数は n^2 であるのに，n 個の関数の規格化と直交化の条件の数はそれより少なく $n(n+1)/2$ に等しいからである．

こともあるだろう．しかし，その領域は時間がたつにつれて無制限に拡大し，しまいには系は無限遠にいってしまうであろう．

実際，連続スペクトルの波動関数の任意の重ね合わせは

$$\Psi=\int a_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(q)dE$$

という形になる．Ψ の絶対値の自乗は 2 重積分の形に書くことができる．

$$|\Psi|^2=\iint a_E a_{E'}^* e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t}\psi_E(q)\psi_{E'}^*(q)dEdE'.$$

ある時間 T の間でこの表式を平均してから T を無限大にもっていくと，振動因子 $e^{i(E'-E)t/\hbar}$ の平均値および全積分は，ともに極限でゼロになる．いいかえれば，配位空間の任意の定点に系が滞在する確率の時間平均はゼロになる．だがこのようなことは，無限大の全空間で運動が行なわれる場合にのみ可能である[1]．

このように，連続スペクトルをもつ定常状態には，系の無限遠への運動が対応している．

§ 11. 行　　列

便宜上，考えている系は離散エネルギー・スペクトルをもつと仮定しよう（以下で得られるすべての関係は，ただちに連続スペクトルの場合にも拡張できる）．$\Psi=\sum a_n\Psi_n$ を定常状態の波動関数 Ψ_n による任意の波動関数の展開であるとしよう．もしもこの展開式を，ある量 f の平均値の定義 (3.8) に代入すれば

$$\bar{f}=\sum_n\sum_m a_n^* a_m f_{nm}(t) \tag{11.1}$$

が得られる．ここで $f_{nm}(t)$ は積分

$$f_{nm}(t)=\int\Psi_n^*\hat{f}\Psi_m dq \tag{11.2}$$

を意味する．量 $f_{nm}(t)$ を可能なすべての n, m について集めた全体を量 f の**行列**と呼ぶ．また，各 $f_{nm}(t)$ を状態 m から状態 n への**遷移**に対応する**行列要素**

1）離散スペクトルの関数の重ね合わせであらわされる波動関数 Ψ では

$$\overline{|\Psi|^2}=\sum_{n,m}a_n a_m^*\overline{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t\right\}}\psi_n\psi_m^*=\sum_n|a_n\psi_n(q)|^2$$

となる．すなわち，確率密度は時間で平均すれば有限になることに注意しよう．

と呼ぶ[1]．

行列要素 $f_{nm}(t)$ の時間依存性は，（もしも演算子 $\hat{f}$ が時間をあらわに含まなければ）関数 Ψ_n の時間依在性によって決められる．これに式（10.1）を代入すれば

$$f_{nm}(t)=f_{nm}e^{i\omega_{nm}t} \tag{11.3}$$

が得られる．ここで

$$\omega_{nm}=\frac{E_n-E_m}{\hbar} \tag{11.4}$$

は，状態 n と m の間の**遷移振動数**であり，量

$$f_{nm}=\int\psi_n^*\hat{f}\psi_m dq \tag{11.5}$$

は，量 f の時間に依存しない行列要素であり，こちらを用いることも多い[2]．

導関数 $\dot{f}$ の行列要素は，量 f の行列要素を時間で微分することによって得られる．これは，平均値 $\bar{\dot{f}}$ が $\dot{\bar{f}}$ に等しいことから，すなわち

$$\bar{\dot{f}}=\dot{\bar{f}}=\sum_n\sum_m a_n^*a_m\dot{f}_{nm}(t) \tag{11.6}$$

からただちに導かれる．したがって（11.3）により，$\dot{f}$ の行列要素として

$$\dot{f}_{nm}(t)=i\omega_{nm}f_{nm}(t) \tag{11.7}$$

が得られる．あるいは（両辺から時間因子 $e^{i\omega_{nm}t}$ を落とせば）時間に依存しない行列要素として

$$(\dot{f})_{nm}=i\omega_{nm}f_{nm}=\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)f_{nm} \tag{11.8}$$

が得られる．

式の記号を簡単にするために，以下ではすべての関係を時間に依存しない行列要素について導くことにしよう．これと同じ関係は，時間に依存する行列に対しても正確に成り立っている．

f と複素共役な量 f^* の行列要素は，共役演算子の定義を考えれば

---

1) 物理量の行列表示は，シュレーディンガーによる波動方程式の発見以前に，ハイゼンベルグ（W. Heisenberg）によって1925年に導入された．この《行列力学》は，その後ボルン（M. Born），ハイゼンベルグ，およびヨルダン（P. Jordan）によって発展された．

2) 規格化された波動関数の位相因子の不定性（§2参照）と関連して，行列要素 f_{nm}（あるいは $f_{nm}(t)$）も $e^{i(\alpha_m-\alpha_n)}$ なる形の因子だけは不定になる．しかしこの不定性が物理的結果に反映することはない．

$$(f^*)_{nm}=\int\psi_n^*\hat{f}^+\psi_m dq=\int\psi_n^*\tilde{\hat{f}}^*\psi_m dq=\int\psi_m\hat{f}^*\psi_n^* dq.$$

すなわち

$$(f^*)_{nm}=(f_{mn})^* \tag{11.9}$$

となる．したがって，通常われわれがもっぱら問題とする実の物理量の場合には（$(f_{mn})^*$ のかわりに f_{mn}^* と書いて）

$$f_{nm}=f_{mn}^* \tag{11.10}$$

である．このような行列は，それに対応する演算子のように，**エルミート行列**と呼ぶ．

$n=m$ の行列要素のことを**対角要素**という．この行列要素は一般に時間に依存せず，また (11.10) から明らかなように実数である．要素 f_{nn} は状態 ψ_n における量 f の平均値をあらわしている．

行列の**積の規則**を求めることは容易である．そのためにはまず，公式

$$\hat{f}\psi_n=\sum_m f_{mn}\psi_m \tag{11.11}$$

が成り立つことに注意する．これは，関数 $\hat{f}\psi_n$ を関数 ψ_m で展開したものに他ならず，その係数は一般的規則 (3.5) によって決められる．この公式を考慮すれば，関数 ψ_n に二つの演算子の積を作用させた結果は次のように書くことができる：

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n=\hat{f}(\hat{g}\psi_n)=\hat{f}\sum_k g_{kn}\psi_k=\sum_k g_{kn}\hat{f}\psi_k=\sum_{k,m} g_{kn}f_{mk}\psi_m.$$

一方

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n=\sum_m (fg)_{mn}\psi_m$$

でなければならないから，積 fg の行列要素は，公式

$$(fg)_{mn}=\sum_k f_{mk}g_{kn} \tag{11.12}$$

によって決定されることになる．この規則は，数学で用いられる行列の積の規則，第一の行列の行と第二の行列の列を掛け合わせる，と同じである．

行列を与えることは，演算子自身を与えることと同等である．とくに，行列を与えればその物理量の固有値とそれに対応した固有関数を定めることが原理的に可能である．

すべての量をあるきまった時刻の値で考えることとし，（この時刻における）

任意の波動関数Ψをハミルトニアンの固有関数，すなわち時間に依存しない定常状態の波動関数ψ_mで展開しよう：

$$\Psi=\sum_m c_m\psi_m. \tag{11.13}$$

ここで展開係数はc_mとあらわした．この展開式を，量fの固有値と固有関数を決める方程式$\hat{f}\Psi=f\Psi$に代入しよう．すると，次式が得られる：

$$\sum_m c_m(\hat{f}\psi_m)=f\sum_m c_m\psi_m.$$

この方程式の両辺にψ_n^*を掛けてqについて積分する．等式の左辺の各積分$\int\psi_n^*\hat{f}\psi_m dq$は対応する行列要素$f_{nm}$に等しい．右辺では$m\neq n$の積分$\int\psi_n^*\psi_m dq$は直交関係によってすべて消え，また規格化条件によって$\int\psi_n^*\psi_n dq=1$となる[1]．それゆえ

$$\sum_m f_{nm}c_m=fc_n, \tag{11.14}$$

あるいは

$$\sum_m (f_{nm}-f\delta_{nm})c_m=0$$

となる．ここで

$$\delta_{nm}=\begin{cases}0, & n\neq m,\\ 1, & n=m.\end{cases}$$

こうしてわれわれは，（未知数c_mに関する）斉1次連立代数方程式を得た．よく知られているように，このような連立方程式がゼロでない解をもつのは，方程式の係数でつくった行列式がゼロになるという条件

$$|f_{nm}-f\delta_{nm}|=0 \tag{11.15}$$

が成り立つ場合のみである．（fを未知数とみなした）この方程式の根は量fの可能な値をあらわす．これらの値の一つfをいれた方程式（11.14）を満足するc_mの組は，このfに対応する固有関数を定める．

量fの行列要素の定義（11.5）の中で，ψ_nとして，もしもこの量の固有関数をとれば，方程式$\hat{f}\psi_n=f_n\psi_n$によって

1）一般則（§5）によって，（11.3）の展開係数c_nの組は《エネルギー表示》（この表示ではエネルギー固有値の番号nが変数である）における波動関数と見なすことができる．このとき行列f_{nm}は，この表示における演算子$\hat{f}$の役割を演じていて，波動関数に対するその作用は（11.14）式の左辺で決められる．また，公式$\bar{f}=\sum\sum c_n^*(f_{nm}c_m)$は，量$f$の平均値を，それの演算子と与えられた状態の波動関数であらわす一般式である．

$$f_{nm}=\int\psi_n^*\hat{f}\psi_m dq=f_m\int\psi_n^*\psi_m dq$$

を得る．関数 ψ_m の規格直交性から，これは $n\neq m$ のとき $f_{nm}=0$ となり，$n=m$ のとき $f_{mm}=f_m$ を与える．したがって，ゼロでないのは対角行列要素だけであり，しかもその値はそれぞれ量 f の対応する固有値に等しい．このように対角行列要素だけがゼロでない行列のことを，**対角化**された行列と呼ぶ．とくに，関数 ψ_n として定常状態の波動関数をとったふつうの表示では，エネルギーの行列（および，定常状態で確定値をとる他のすべての物理量の行列）は対角形である．一般に，ある演算子 $\hat{g}$ の固有関数を用いて定義された量 f の行列のことを，g を対角化する表示における f の行列と呼ぶ．これからはとくに断わらないかぎり，物理量の行列といえば，エネルギーを対角化するふつうの表示における行列のことである．行列の時間依存性に関して上で論じたことは，すべてこのふつうの表示のときの話である[1]．

演算子の行列表示を用いれば，§4 で述べた定理——もしも二つの演算子が可換であれば，それらに共通な固有関数の完全系がある——を証明することができる．$\hat{f}$ と $\hat{g}$ をこのような二つの演算子としよう．$\hat{f}\hat{g}=\hat{g}\hat{f}$ と行列の乗法 (11.12) から

$$\sum_k f_{mk}g_{kn}=\sum_k g_{mk}f_{kn}$$

が導かれる．行列要素を計算するために用いる関数系 ψ_n として，演算子 $\hat{f}$ の固有関数をとれば，$m\neq k$ のとき $f_{mk}=0$ であり，上記の等式は $f_{mm}g_{mn}=g_{mn}f_{nn}$ あるいは

$$g_{mn}(f_m-f_n)=0$$

となる．もしも量 f のすべての固有値 f_n が異なれば，$m\neq n$ なるすべての場合に $f_m-f_n\neq 0$ である．したがって，$g_{mn}=0$ でなければならない．こうして行列 g_{mn} も対角形であることがわかった．すなわち，関数 ψ_n は物理量 g の固有関数でもある．もしも値 f_n の中に同じものがあれば（すなわち，いくつかの異なる固有関数が同じ固有値に属していれば），このような関数 ψ_n の組合せのあいだの行列要素 g_{mn} は一般にはゼロでない．しかし，量 f の一つの固有値に属する関数 ψ_n の1次結合も，またその固有関数である．そこで，対応する

1) エネルギー行列が対角形であることを考えればすぐわかるように，(11.8) は演算子の関係 (9.2) を行列の形に書いた式である．

非対角行列要素 g_{mn} がゼロになるように，この1次結合を選ぶことがいつもできる．したがって，この場合にも同時に演算子 $\hat{f}$ と $\hat{g}$ の固有関数であるような関数系が得られることになる．

ついでに，つぎの有用な公式に注目しよう：

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \lambda}\right)_{nn}=\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}. \tag{11.16}$$

ここで，λ はハミルトニアン $\hat{H}$（およびエネルギー固有値 E_n）の依存するパラメーターである．実際，方程式 $(\hat{H}-E_n)\psi_n=0$ を λ で微分したのち，その左側から ψ_n^* を掛けると

$$\psi_n^*(\hat{H}-E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}=\psi_n^*\left(\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}-\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\right)\psi_n$$

が得られる．q で積分するとこの等式の左辺はゼロになる．なぜならば，演算子 $\hat{H}$ のエルミート性によって

$$\int\psi_n^*(\hat{H}-E_n)\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}dq=\int\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}(\hat{H}-E_n)^*\psi_n^*dq$$

となるからである．そして右辺はゼロとなって，求める等式を与える．

行列要素 f_{nm} を

$$\langle n|f|m\rangle \tag{11.17}$$

のように書く記号系が，いまでは広く用いられている（これはディラックによって導入された）[1]．この記号は，物理量の記号 f および，それぞれ始状態と終状態そのものをあらわす記号 $|m\rangle$ と $\langle n|$ が《合体して》できたものと考えることができる（ここで，用いられる状態の波動関数の表示は何でもよい）．この同じ記号を用いて，波動関数の展開係数の記号を作ることができる．波動関数の完全系があって，状態 $|n_1\rangle, |n_2\rangle, \cdots$ に対応しているとしよう．すると，ある状態 $|m\rangle$ の波動関数のこれによる展開係数は，$\langle n_i|m\rangle$ とあらわされる．すなわち

$$\langle n_i|m\rangle=\int\psi_{n_i}^*\psi_m dq \tag{11.18}$$

となる．

1）本書では行列要素のこの二つの書き方を，どちらも使っている．記号（11.17）は，各添字を数個の文字の集まりの形にあらわさなければならない場合にとくに便利である．

§ 12. 行列の変換

一つの物理量の行列要素を波動関数の違った組について定義することが可能である．それはたとえば，物理量の異なる組合せで記述される定常状態の波動関数であったり，同一の系が異なる外場の中に置かれたときの定常状態の波動関数などであったりする．これと関連して，ある表示から他の表示へ行列を変換する問題が生じる．

$\psi_n(q)$ および $\psi'_n(q)$ $(n=1,2,\cdots)$ を二つの規格直交完全関数系としよう．これらは互いに1次変換

$$\psi'_n=\sum_m S_{mn}\psi_m \qquad (12.1)$$

によって結ばれている．これは完全関数系 ψ_n による関数 ψ'_n の単なる展開である．この変換は便宜的に演算子の形

$$\psi'_n=\hat{S}\psi_n \qquad (12.2)$$

に書くことができる．

関数 ψ_n が規格直交であるときに，関数 ψ'_n の規格直交性を保証するためには，演算子 $\hat{S}$ は一定の条件を満たさなければならない．実際に，(12.2) を条件 $\int\psi'^*_m\psi'_n dq=\delta_{mn}$ に代入し，転置演算子の定義 (3.14) を考慮すれば，次式が得られる：

$$\int(\hat{S}\psi_n)\hat{S}^*\psi^*_m dq=\int\psi^*_m\tilde{\hat{S}}^*\hat{S}\psi_n dq=\delta_{nm}.$$

この等式がすべての m, n について成り立つためには，$\tilde{\hat{S}}^*\hat{S}=1$，あるいは

$$\tilde{\hat{S}}^*\equiv\hat{S}^+=\hat{S}^{-1} \qquad (12.3)$$

でなければならない．すなわち，逆演算子と共役演算子が等しくなければならない．このような性質をもつ演算子のことを**ユニタリ演算子**と呼ぶ．この変換の性質があれば，変換 $\psi_n=\hat{S}^{-1}\psi'_n$ すなわち (12.1) の逆変換は，公式

$$\psi_n=\sum_m S^*_{nm}\psi'_m \qquad (12.4)$$

で与えられる．

等式 $\hat{S}^+\hat{S}=1$ あるいは $\hat{S}\hat{S}^+=1$ を行列の形に書けば，ユニタリ性の条件はつぎの形になる：

$$\sum_l S^*_{lm}S_{ln}=\delta_{mn} \qquad (12.5)$$

あるいは

$$\sum_l S^*_{ml} S_{nl} = \delta_{mn}. \tag{12.6}$$

つぎに任意の物理量fを考え，その行列要素を《新しい》表示，すなわち関数ψ'_nによる表示で書いてみよう．それはつぎの積分で与えられる：

$$\int \psi'^*_m \hat{f} \psi'_n dq = \int (\hat{S}^* \psi^*_m)(\hat{f} \hat{S} \psi_n) dq = \int \psi^*_m \tilde{\hat{S}}^* \hat{f} \hat{S} \psi_n dq = \int \psi^*_m \hat{S}^{-1} \hat{f} \hat{S} \psi_n dq.$$

これから明らかなように，演算子$\hat{f}$の新しい表示での行列は，古い表示の次のような演算子の行列

$$\hat{f}' = \hat{S}^{-1} \hat{f} \hat{S} \tag{12.7}$$

に等しい[1]．

行列の対角要素の和を行列の**跡**と呼び，$\mathrm{Sp}\, f$ のようにあらわす[2]：

$$\mathrm{Sp}\, f = \sum_n f_{nn}. \tag{12.8}$$

まずはじめに，二つの行列の積の跡はその積の順序に依存しないことに注意しよう：

$$\mathrm{Sp}\,(fg) = \mathrm{Sp}\,(gf). \tag{12.9}$$

実際に，行列の積の規則により

$$\mathrm{Sp}\,(fg) = \sum_n \sum_k f_{nk} g_{kn} = \sum_k \sum_n g_{kn} f_{nk} = \mathrm{Sp}\,(gf)$$

を得る．3個以上の行列の積についても同様にして，積の順序を循環的に置換するかぎりその跡が不変であること，すなわち

$$\mathrm{Sp}\,(fgh) = \mathrm{Sp}\,(hfg) = \mathrm{Sp}\,(ghf) \tag{12.10}$$

を容易に証明することができる．

跡のもっとも重要な性質は，それが，行列要素を定義する関数系の選び方に

1）もしも，$\{\hat{f}, \hat{g}\} = -i\hbar\hat{c}$ が二つの演算子$\hat{f}$と$\hat{g}$の交換則であれば，変換（12.7）の後も，$\{\hat{f}', \hat{g}'\} = -i\hbar\hat{c}'$ が得られる．すなわち，交換則はもとのままである．33頁の脚注で注意したように，$\hat{c}$は古典的なポアソン括弧$[f, g]$の量子版である．ところが古典力学では，ポアソン括弧は変数（一般化座標と運動量）のカノニカル変換に対して不変である（第Ⅰ巻『力学』§45参照）．この意味で，ユニタリ変換は量子力学のなかで，古典力学のカノニカル変換と同様の役柄を演じている，ということができる．

2）これは跡を意味するドイツ語 Spur からきている．また，英語の trace に由来する記号 Tr を用いることもある．跡に関する議論は，もちろん，nについての和が収束することを前提としている．

無関係なことである．実際

$$\mathrm{Sp}\, f'=\mathrm{Sp}\,(S^{-1}fS)=\mathrm{Sp}\,(SS^{-1}f)=\mathrm{Sp}\, f \tag{12.11}$$

となる．

また，ユニタリ変換は変換される波動関数の絶対値の自乗の和を不変に保つことにも留意しよう．実際，(12.6) を使うと

$$\sum_i |\psi_i'|^2=\sum_{k,l,i} S_{ki}\psi_k S_{li}^*\psi_l^*=\sum_{k,l}\psi_k\psi_l^*\delta_{kl}=\sum_k |\psi_k|^2 \tag{12.12}$$

となる．

すべてのユニタリ演算子はつぎの形にあらわすことができる：

$$\hat{S}=e^{i\hat{R}}, \tag{12.13}$$

ここで，$\hat{R}$ はエルミート演算子である．実際，$\hat{R}^+=\hat{R}$ から

$$\hat{S}^+=e^{-i\hat{R}^+}=e^{-i\hat{R}}=\hat{S}^{-1}$$

が導かれる．つぎの展開を考えよう

$$\hat{f}'=\hat{S}^{-1}\hat{f}\hat{S}=\hat{f}+\{\hat{f}, i\hat{R}\}+\frac{1}{2}\{\{\hat{f}, i\hat{R}\}, i\hat{R}\}+\cdots, \tag{12.14}$$

これは，因子 $\exp(\pm i\hat{R})$ を演算子 $\hat{R}$ のベキに展開することで，すぐ証明される．この展開(12.14)は，$\hat{R}$ が小さなパラメーターに比例している場合には，そのパラメーターに関するベキ展開になるので，有用な式であることがわかる．

§ 13. 演算子のハイゼンベルグ表示

いままで述べてきた量子力学の数学的枠組では，いろいろな物理量に対応する演算子は座標の関数に作用し，通常それ自身は時間依存性をあらわに含まない．物理量の平均値の時間依存性は，公式

$$\bar{f}(t)=\int\Psi^*(q,t)\hat{f}\Psi(q,t)dq \tag{13.1}$$

に従い，状態の波動関数の時間依存性を通じてのみ入ってくる．

しかし，量子力学の枠組をすこし異なっているが同等な形に定式化して，時間依存性を波動関数から演算子の方へ移すことができる．本書ではこのような演算子の表示（**シュレーディンガー**と区別して，**ハイゼンベルグ**表示と呼んでいる）は用いないけれども，将来の相対論的理論での応用のことを考えて，ここでそれを定式化しておこう．

つぎのユニタリ演算子（(12.13) と比較せよ）を導入する

$$\hat{S}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \tag{13.2}$$

ここで $\hat{H}$ は系のハミルトニアンである．定義によりこの演算子の固有関数は演算子 $\hat{H}$ の固有関数，すなわち定常状態の波動関数 $\psi_n(q)$ に等しい．すなわち

$$\hat{S}\psi_n(q)=e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\psi_n(q). \tag{13.3}$$

このことから，定常状態の波動関数による任意の波動関数 Ψ の展開式 (10.3) は，演算子形式で

$$\Psi(q,t)=\hat{S}\Psi(q,0) \tag{13.4}$$

と書かれることがわかる．すなわち，演算子 $\hat{S}$ を作用させると，あるはじめの時刻の系の波動関数は任意の時刻の波動関数に移される．

(12.7) によって，時間に依存する演算子

$$\hat{f}(t)=\hat{S}^{-1}\hat{f}\hat{S} \tag{13.5}$$

を導入し

$$\bar{f}(t)=\int\Psi^*(q,0)\hat{f}(t)\Psi(q,0)dq \tag{13.6}$$

と書こう．すなわち，量 f の平均値をあらわす公式（演算子を定義する公式）を時間依存性が完全に演算子の方へ移った形に表わそう．

明らかに，演算子 (13.5) の定常状態の波動関数に関する行列要素は，式 (11.3) で定義される時間に依存する行列要素 $f_{nm}(t)$ と一致している．

最後に，式 (13.5) を時間で微分すると（このとき演算子 $\hat{f}$ と $\hat{H}$ 自身は t を含まないものとする)．つぎの方程式が得られる：

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}(t)=\frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{f}(t)-\hat{f}(t)\hat{H}]. \tag{13.7}$$

これは公式 (9.2) と類似してはいるが，いささか違った意味をもっている．式 (9.2) は物理量 $\dot{f}$ に対応する演算子 $\hat{\dot{f}}$ の定義であるが，方程式 (13.7) の左辺は f という量そのものの演算子の時間微分である．

§14. 密度行列

波動関数を用いた系の記述は，§1の終りに述べた意味で，量子力学で許さ

れる最も完全な記述である．

しかし，ある大きな閉じた系の部分系を考察しようとすると，われわれはこのような記述のできない状況に遭遇する．閉じた系は全体として波動関数 $\Psi(q, x)$ で記述される状態にあると仮定しよう．ここで x は考察している系の座標の組をあらわし，q は閉じた系の残りの座標をあらわしている．一般的には，この関数が x だけの関数と q だけの関数の積に分解されるようなことはない．（部分）系は固有の波動関数をもたないからである[1]．

f を，考えている（部分）系に関係したある物理量としよう．それゆえこれの演算子は座標 x だけに作用し q には作用しない．考えている状態におけるこの量の平均値は

$$\bar{f}=\iint\Psi^*(q, x)\hat{f}\Psi(q, x)dqdx \tag{14.1}$$

である．つぎのように定義される関数 $\rho(x, x')$ を導入しよう：

$$\rho(x, x')=\int\Psi(q, x)\Psi^*(q, x')dq. \tag{14.2}$$

ここで積分は座標 q についてのみ行なうものとする．これは系の**密度行列**と呼ばれる．定義（14.2）から明らかなように，これは《エルミート性》をもっている：

$$\rho^*(x, x')=\rho(x', x). \tag{14.3}$$

密度行列の《対角要素》

$$\rho(x, x)=\int|\Psi(q, x)|^2dq$$

は系の座標の確率分布を定める．

密度行列を用いると平均値 $\bar{f}$ はつぎの形に書くことができる：

$$\bar{f}=\int[\hat{f}\rho(x, x')]_{x'=x}dx. \tag{14.4}$$

ここで $\hat{f}$ は関数 $\rho(x, x')$ の変数 x' だけに作用し，演算の結果を計算したあとで $x'=x$ と置かなければならない．これで密度行列を知れば系を特徴づける任

1) $\Psi(q, x)$ が（ある時刻に）このような積に分解できるためには，この状態を生ずる原因となる測定によって，閉じた系の中の考えている部分系と残りの部分がそれぞれ別々に完全に記述されなければならない．またそれ以後の時刻にも $\Psi(q, x)$ がこのような形をとり続けるためには，閉じた系の中のこれらの部分が互いに相互作用をしないことが必要である（§2 参照）．いまはこのどちらも仮定していない．

意の量の平均値を計算できることがわかった．したがって，$\rho(x, x')$ を用いれば系の物理量がいろいろな値をとる確率を求めることができる．このように波動関数をもたない（部分）系の状態は密度行列を用いて記述することができる．密度行列はこの系に関係のない q 座標は含まないが，もちろん根本では閉じた系全体の状態に依存している．

密度行列を使った記述法が，系を量子力学的に記述するもっとも一般的な形である．波動関数を使う記述は対応する密度行列の形が $\rho(x, x')=\Psi(x)\Psi^*(x')$ であるような特別な場合に相当する．この特別な場合と一般の場合には次のような重要な相違がある．波動関数をもつ状態（このような状態は**純粋状態**と呼ばれる）に対しては，確実に一定の結果を導くような測定過程の完全系が存在する（数学的には，これは Ψ がある演算子の固有関数であることを意味する）．密度行列のみをもつ状態（これは**混合状態**と呼ばれる）に対しては，予測された結果を一意的に導くような測定過程の完全系は存在しない．

考えている系が閉じているか，またはある時刻からそのようになったと仮定しよう．そのとき Ψ 関数に対する波動方程式と類似した，密度行列の時間変化を決定する方程式を導いてみよう．そのためには，系が波動関数をもち

$$\rho(x, x', t)=\Psi(x, t)\Psi^*(x', t)$$

となる特別な場合にも，$\rho(x, x', t)$ は求める線形微分方程式を満たされなければならないことに着目すればよい．上式の時間微分を行ない，波動方程式（8.1）を用いれば，次式が得られる：

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=i\hbar\Psi^*(x', t)\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t}+i\hbar\Psi(x, t)\frac{\partial\Psi^*(x', t)}{\partial t}$$
$$=\Psi^*(x', t)\hat{H}\Psi(x, t)-\Psi(x, t)\hat{H}'^*\Psi^*(x', t).$$

ここで $\hat{H}$ は x の関数に作用する系のハミルトニアン，$\hat{H}'$ は x' の関数に作用する同様の演算子である．関数 $\Psi^*(x', t)$ と $\Psi(x, t)$ は，それぞれ演算子 $\hat{H}$ および $\hat{H}'$ の記号のうしろに置くことができる．したがって求める方程式はつぎのようになる：

$$i\hbar\frac{\partial\rho(x, x', t)}{\partial t}=(\hat{H}-\hat{H}'^*)\rho(x, x', t). \tag{14.5}$$

$\Psi_n(x, t)$ を系の定常状態の波動関数，すなわちハミルトニアンの固有関数としよう．密度行列をこの関数について展開しよう．この展開は二重級数であら

わされ，つぎのように書かれる：

$$\rho(x, x', t) = \sum_m \sum_n a_{mn} \Psi_n^*(x', t) \Psi_m(x, t)$$
$$= \sum_m \sum_n a_{mn} \psi_n^*(x') \psi_m(x) e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t}. \qquad (14.6)$$

この展開は，展開式（10.3）が波動関数のために果した役割と同様の役割を密度行列ために果している．係数 a_n の組のかわりに，ここでは係数 a_{mn} の二重の組がある．明らかにこの量は，密度行列自身と同じくエルミート性をもっている：

$$a_{nm}^* = a_{mn}. \qquad (14.7)$$

ある量 f の平均値は，（14.6）を（14.4）に代入して次のようになる：

$$\bar{f} = \sum_m \sum_n a_{mn} \int \Psi_n^*(x, t) \hat{f} \Psi_m(x, t) dx,$$

あるいは

$$\bar{f} = \sum_m \sum_n a_{mn} f_{nm}(t) = \sum_m \sum_n a_{mn} f_{nm} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t}. \qquad (14.8)$$

ここで f_{mn} は量 f の行列要素である．この式は公式（11.1）と類似の式である[1]．

量 a_{mn} は一定の不等式を満たさなければならない．密度行列の《対角要素》$\rho(x, x)$ は座標の確率分布を与えるので，明らかに正の量でなければならない．それゆえ（$x' = x$ と置いた）式（14.6）により，係数 a_{mn} を用いてつくられる2次形式

$$\sum_n \sum_m a_{mn} \xi_n^* \xi_m$$

（ここで ξ_n は任意の複素量）は正の定符号をもたなければならないことになる．このことは量 a_{mn} に2次形式の理論でよく知られた条件を課すことになる．たとえば，すべての対角要素は明らかに正でなければならない：

$$a_{nn} \geqq 0. \qquad (14.9)$$

また三つの量 a_{nn}, a_{mm}, a_{mn} はそれぞれつぎの不等式を満たさなければならない：

$$a_{nn} a_{mm} \geqq |a_{mn}|^2. \qquad (14.10)$$

1）量 a_{mn} はエネルギー表示の密度行列になっている．この行列を用いた系の状態の記述法は，1927年にランダウ（Л. Ландау）とブロッホ（F. Bloch）によってそれぞれ独立に導入された．

密度行列が関数の積に帰着される《純粋な》場合は，行列 a_{mn} が

$$a_{mn}=a_m a_n^* \tag{14.11}$$

となる場合に相当する．問題にしているのが《純粋》状態であるか，それとも《混合》状態であるかを，行列 a_{mn} から決める簡単な判別法を示そう．純粋状態の場合には

$$(a^2)_{mn}=\sum_k a_{mk}a_{kn}=\sum_k a_k^* a_m a_n^* a_k=a_m a_n^*\sum_k |a_k|^2=a_m a_n^*$$

あるいは

$$(a^2)_{mn}=a_{mn} \tag{14.12}$$

となる．すなわち密度行列の自乗はそれ自身に一致する．

§15. 運　動　量

外場の中に置かれていない閉じた粒子系を考察しよう．このような系全体の位置は空間内のどこでも同等であるから，任意の距離だけ系を平行移動してもこの系のハミルトニアンは変わらないといえるだろう．この条件は任意の無限小変位に対して満たされることを要求すれば十分である．そうすれば，これはあらゆる有限の変位に対しても満たされるからである．

距離 $\delta\boldsymbol{r}$ だけの無限小平行変位は，すべての粒子の動径ベクトル $\boldsymbol{r}_a$（a は粒子の番号）が同じ変化 $\delta\boldsymbol{r}$ をうけるような変換：$\boldsymbol{r}_a\to\boldsymbol{r}_a+\delta\boldsymbol{r}$ を意味する．粒子座標の任意の関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)$ は，このような変換によって次の関数へ移る：

$$\psi(\boldsymbol{r}_1+\delta\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2+\delta\boldsymbol{r}, \cdots)=\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)+\delta\boldsymbol{r}\sum_a \nabla_a\psi$$
$$=\left(1+\delta\boldsymbol{r}\sum_a \nabla_a\right)\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)$$

（∇_a は $\boldsymbol{r}_a$ に関する微分演算子である）．表式

$$1+\delta\boldsymbol{r}\sum_a \nabla_a$$

は，関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)$ を関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1+\delta\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2+\delta\boldsymbol{r}, \cdots)$ へ移す無限小移動の演算子である．

ある変換がハミルトニアンを変化させないということは，この変換を関数 $\hat{H}\psi$ に施す場合と，関数 ψ だけに変換を施したのちに演算子 $\hat{H}$ を作用させる場合と，結果がちょうど等しくなるということである．数学的にはこれは次のように書くことができる．考えているような変換を《生ずる》演算子を $\hat{O}$ と

する．そうすると $\hat{O}(\hat{H}\psi)=\hat{H}(\hat{O}\psi)$ であるから

$$\hat{O}\hat{H}-\hat{H}\hat{O}=0$$

となる．すなわちハミルトニアンは演算子 $\hat{O}$ と可換でなければならない．

いまの場合，演算子 $\hat{O}$ は無限小移動の演算子である．単位演算子（1を掛ける演算子）はもちろんすべての演算子と可換であり，また定因子 $\delta\boldsymbol{r}$ は $\hat{H}$ の記号の外に出すことができるから，条件 $\hat{O}\hat{H}-\hat{H}\hat{O}=0$ は次の条件になる：

$$(\sum_a \nabla_a)\hat{H}-\hat{H}(\sum_a \nabla_a)=0. \tag{15.1}$$

すでに知っているように，（時間をあらわに含まない）ある演算子が $\hat{H}$ と可換であることは，この演算子に対応する物理量が保存されることを意味する．閉じた系において空間の一様性から保存性が導かれる量は運動量である．（第I巻『力学』§7参照）．したがって（15.1）の関係は量子力学における運動量の保存則をあらわしている．だから演算子 $\sum_a \nabla_a$ は定係数を除いて系の全運動量に対応し，この和の各項は個別粒子の運動量に対応しなければならない．

粒子の運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ と演算子 ∇ の間の比例係数は，古典力学への極限移行を用いて決定でき，そして $-i\hbar$ に等しい．

$$\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla \tag{15.2}$$

あるいは成分で書けば

$$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad \hat{p}_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad \hat{p}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

である．実際，波動関数の極限の表式（6.1）を用いると，

$$\hat{\boldsymbol{p}}\Psi=-i\hbar\frac{i}{\hbar}\Psi\nabla S=\Psi\nabla S$$

となる．すなわち，古典近似では演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ の演算は ∇S の乗算になる．ところが作用 S の勾配は粒子の古典的運動量 $\boldsymbol{p}$ に他ならない（第I巻『力学』§43参照）．

当然ではあるが演算子（15.2）がエルミートであることを確かめるのは容易である．実際，無限遠でゼロになる任意の関数 $\psi(x)$ と $\varphi(x)$ について

$$\int\varphi\hat{p}_x\psi dx=-i\hbar\int\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=i\hbar\int\psi\frac{\partial\varphi}{\partial x}dx=\int\psi\hat{p}_x^*\varphi dx$$

であり，これは演算子のエルミート性の条件である．

関数を二つの異なる変数で微分した結果は微分の順序に依存しないから，明

らかに運動量の3成分の演算子は互いに可換である：

$$\hat{p}_x\hat{p}_y-\hat{p}_y\hat{p}_x=0,\quad \hat{p}_x\hat{p}_z-\hat{p}_z\hat{p}_x=0,\quad \hat{p}_y\hat{p}_z-\hat{p}_z\hat{p}_y=0. \tag{15.3}$$

これは粒子の運動量の3成分がすべて同時に確定値をとり得ることを意味している．

運動量演算子の固有関数と固有値を求めよう．それはベクトル方程式

$$-i\hbar\nabla\psi=\boldsymbol{p}\psi \tag{15.4}$$

によって決定される．その解の形は

$$\psi=\text{const}\cdot e^{i\boldsymbol{pr}/\hbar} \tag{15.5}$$

である．運動量の3成分を同時に与えると，粒子の波動関数は完全に決まる．いいかえれば量 p_x, p_y, p_z は粒子の物理量の完全系の一つになっている．その固有値は $-\infty$ から $+\infty$ まで広がって連続スペクトルを形成する．

連続スペクトルの固有関数の規格化条件 (5.4) によれば，積分 $\int\psi_{\boldsymbol{p}'}^*\psi_{\boldsymbol{p}}dV$ を全空間で行なうと ($dV=dxdydz$)，デルタ関数 $\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})$ にならなければならない[1]．しかし，以下の応用で明らかになる理由から，粒子の運動量の固有関数の規格化は，運動量の差を $2\pi\hbar$ で割ったものを引数とするデルタ関数で規格化するのが，より自然である：

$$\int\psi_{\boldsymbol{p}'}^*\psi_{\boldsymbol{p}}dV=\delta\left(\frac{\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}}{2\pi\hbar}\right)$$

あるいは，同じことだが

$$\int\psi_{\boldsymbol{p}'}^*\psi_{\boldsymbol{p}}dV=(2\pi\hbar)^3\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}) \tag{15.6}$$

(なぜならば，3次元デルタ関数を分解してできる3因子のそれぞれが，$\delta((p_x'-p_x)/2\pi\hbar)=2\pi\hbar\delta(p_x'-p_x)$ 等となるからである)．

この積分は公式[2]

---

1) ベクトル変数 $\boldsymbol{a}$ のデルタ関数（3次元 δ-関数）は，ベクトルの各成分のデルタ関数の積として定義される：$\delta(\boldsymbol{a})=\delta(a_x)\delta(a_y)\delta(a_z)$.

2) この公式の含意は，左辺の関数がデルタ関数特有の性質 (5.8) をもっているということである．実際，(15.7) のようにあらわした関数 $\delta(x-a)$ を (5.8) に代入すると，よく知られたフーリエの積分公式

$$f(a)=\iint_{-\infty}^{\infty}f(x)e^{i\xi(x-a)}dx\frac{d\xi}{2\pi}$$

が得られる．

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha x}dx=\delta(\alpha) \tag{15.7}$$

を用いて行なうことができる．これから明らかなように，(15.6) にしたがって規格化すると，関数 (15.5) の中の const は 1 としなければならない[1]：

$$\psi_p=e^{i\boldsymbol{pr}/\hbar}. \tag{15.8}$$

任意の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ をその運動量固有関数で展開することは，フーリエ積分への展開に他ならない：

$$\psi(\boldsymbol{r})=\int a(\boldsymbol{p})\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=\int a(p)e^{i\boldsymbol{pr}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \tag{15.9}$$

($d^3p=dp_xdp_ydp_z$)．展開係数は，公式 (5.3) によって

$$a(\boldsymbol{p})=\int\psi(\boldsymbol{r})\psi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r})dV=\int\psi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{pr}/\hbar}dV \tag{15.10}$$

に等しい．

関数 $a(\boldsymbol{p})$ は運動量表示における粒子の波動関数とみなすことができる（§5 参照)．すなわち，

$$|a(\boldsymbol{p})|^2\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

は運動量が d^3p の間の値をとる確率である．

座標表示では，演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ を運動量に対応させて，それの固有関数を定めているが，それと同じように，運動量表示では，粒子の座標演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ を導入することができる．それは座標の平均値が次の形にあらわされるように定義されなければならない：

$$\bar{\boldsymbol{r}}=\int a^*(\boldsymbol{p})\hat{\boldsymbol{r}}a(\boldsymbol{p})\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{15.11}$$

他方，これと同じ平均値は，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ を用いて

$$\bar{\boldsymbol{r}}=\int\psi^*\boldsymbol{r}\psi dV$$

によって定義されている．(15.9) の形の $\psi(\boldsymbol{r})$ を代入し，部分積分を実行すれば，次の式が得られる：

---

1) このように規格化すると，確率密度は $|\psi|^2=1$，すなわち，この関数は《単位体積中に1粒子》で規格化されていることに注意しよう．この規格化に二つの意味があることは，もちろん，偶然ではない．203頁の脚注を見よ．

$$\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r})=\int \boldsymbol{r}a(\boldsymbol{p})e^{i\boldsymbol{pr}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=\int i\hbar e^{i\boldsymbol{pr}/\hbar}\frac{\partial a(\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

この式と（15.10）を用いると

$$\bar{\boldsymbol{r}}=\iint\psi^*(\boldsymbol{r})i\hbar\frac{\partial a(\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{pr}/\hbar}dV\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=\int i\hbar a^*(\boldsymbol{p})\frac{\partial a(\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

が得られる．（15.11）と比較すれば，運動量表示における動径ベクトル演算子は

$$\hat{\boldsymbol{r}}=i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}} \tag{15.12}$$

であることがわかる．またこの表示における運動量演算子は，単純に$\boldsymbol{p}$の掛け算になる．

最後に，空間を任意の（無限小に限らず）有限な距離$\boldsymbol{a}$だけ平行移動させる演算子の$\hat{\boldsymbol{p}}$による表式を導いておこう．このような演算子（$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}$と呼ぶことにしよう）は定義によって

$$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}\psi(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a})$$

でなければならない．関数$\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a})$をテイラー級数に展開すると

$$\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a})=\psi(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{a}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}}+\cdots$$

となる．あるいは，演算子$\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla$を導入して

$$\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a})=\left[1+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{p}}\right)^2+\cdots\right]\psi(\boldsymbol{r})$$

となる．角括弧の中にある表式は演算子

$$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{p}}\right) \tag{15.13}$$

をあらわしている．これが求める**有限変位の演算子**である．

§16. 不確定関係

運動量演算子と座標演算子の間の交換則を求めよう．変数x, y, zのうちのどれか一つについての微分と，それ以外の変数の掛け算をつづけて行なった結果は，演算の順序には依存しないので

$$\hat{p}_x y-y\hat{p}_x=0,\qquad \hat{p}_x z-z\hat{p}_x=0 \tag{16.1}$$

である．$\hat{p}_y, \hat{p}_z$についても同様である．

$\hat{p}_x$ と x の交換則を導くために，つぎのように書く：

$$(\hat{p}_x x - x\hat{p}_x)\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi.$$

これからわかるように，演算子 $\hat{p}_x x - x\hat{p}_x$ を作用させた結果は，関数に $-i\hbar$ を掛けたものになる．もちろん $\hat{p}_y$ と y，$\hat{p}_z$ と z の交換子についても同じことがいえる．したがって

$$\hat{p}_x x - x\hat{p}_x = -i\hbar, \quad \hat{p}_y y - y\hat{p}_y = -i\hbar, \quad \hat{p}_z z - z\hat{p}_z = -i\hbar \tag{16.2}$$

が得られる[1]．

(16.1) および (16.2) の関係はまとめて次の形に書くことができる：

$$\hat{p}_i x_k - x_k\hat{p}_i = -i\hbar\delta_{ik}, \qquad i, k = x, y, z. \tag{16.3}$$

これらの関係とこれから得られる帰結の物理的意味を明らかにするまえに，あとで便利な二つの公式を導いておこう．$f(\boldsymbol{r})$ を座標の関数とすれば

$$\hat{\boldsymbol{p}}f(\boldsymbol{r}) - f(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla f \tag{16.4}$$

である．実際

$$(\hat{\boldsymbol{p}}f - f\hat{\boldsymbol{p}})\psi = -i\hbar[\nabla(f\psi) - f\nabla\psi] = -i\hbar\psi\nabla f$$

となる．類似の関係が $\boldsymbol{r}$ と運動量演算子の関数 $f(\hat{\boldsymbol{p}})$ との交換子に対しても成り立つ：

$$f(\hat{\boldsymbol{p}})\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}f(\hat{\boldsymbol{p}}) = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}. \tag{16.5}$$

これは座標演算子として表式 (15.12) を用いて運動量表示で計算を進めると，(16.4) と同じようにして導くことができる．

(16.1) および (16.2) の関係は，一つの座標軸上の粒子の座標は他の 2 軸方向の運動量成分と同時に確定値をとり得るが，同一軸方向の座標と運動量は同時には存在しないことを示している．たとえば，粒子は空間の一定点にあると同時に確定した運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつことはできない．

粒子が空間のある有限の領域にあると仮定しよう．その領域の大きさは 3 軸に沿って $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ の程度であるとする．さらに粒子の運動量の平均値を $\boldsymbol{p}_0$ としよう．数学的にはこれは波動関数が $\psi = u(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{p}_0\boldsymbol{r}/\hbar}$ の形をもち，関数 $u(\boldsymbol{r})$ が空間の上記の領域の中だけでゼロと大きく異なることを意味している．関数

1) 1925年にハイゼンベルグによって行列の形で発見されたこの関係は，現代量子力学形成の出発点となった．

ψを運動量演算子の固有関数で（すなわちフーリエ積分の形に）展開しよう．

これの展開係数 $a(\boldsymbol{p})$ は $u(\boldsymbol{r})e^{i(\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p})\boldsymbol{r}/\hbar}$ なる形をした関数の積分（15.10）によって決定される．この積分がゼロよりずっと大きくなるためには，振動因子 $e^{i(\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p})\boldsymbol{r}/\hbar}$ の周期が，関数 $u(\boldsymbol{r})$ のゼロでない領域の大きさ $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ に比べて短かくなってはいけない．これは，$\boldsymbol{p}$ が $(p_{0x}-p_x)\Delta x/\hbar \lesssim 1$ となるような値をとる場合にのみ $a(\boldsymbol{p})$ もゼロよりずっと大きくなることを意味している．$|a(\boldsymbol{p})|^2$ は運動量がいろいろな値をとる確率であるから，$a(\boldsymbol{p})$ をゼロとしない p_x, p_y, p_z の値の範囲は，その状態において粒子の運動量成分がとる値の範囲に他ならない．したがってこの範囲を $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ であらわすと

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar, \qquad \Delta p_y \Delta y \sim \hbar, \qquad \Delta p_z \Delta z \sim \hbar \tag{16.6}$$

となる．この**不確定関係**はハイゼンベルグによって1927年に得られた．

これからわかるように，粒子の座標をよい精度で知れば知るほど（すなわち Δx が小さければ小さいほど），同じ軸方向の運動量成分の値の不確定 Δp_x は大きくなる．またその逆もいえる．とくに，もしも粒子が厳密に空間のある一点にあれば（$\Delta x=\Delta y=\Delta z=0$），$\Delta p_x=\Delta p_y=\Delta p_z=\infty$ となる．これはすべての運動量がこのとき同じ確率で起こりうることを示している．反対に，もしも粒子が厳密に一定の運動量 $\boldsymbol{p}$ をもてば，粒子の位置は空間のどこでも同じ確率になる（このことは波動関数（15.8）からも直接にわかる．この絶対値の自乗はまったく座標に依存しないからである）．

もしも，座標と運動量の不確定さをゆらぎの自乗平均を使って

$$\delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}, \qquad \delta p_x = \sqrt{\overline{(p_x-\bar{p}_x)^2}}$$

とあらわすことにすると，これらの積の最低の可能な値を正確に評価することができる（H. Weyl）．

1次元の場合，1個の座標のみに依存する波動関数 $\psi(x)$ で表わされる波束を考えよう．かんたんのために，この状態の x と p_x の平均値はゼロに等しいと仮定しよう．自明な不等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geqslant 0$$

から出発する．ここで，α は任意の実定数である．この積分を計算するときには，つぎの式に注意しよう．

$$\int x^2|\psi|^2dx=(\delta x)^2,$$

$$\int\left(x\frac{d\psi^*}{dx}\psi+x\psi^*\frac{d\psi}{dx}\right)dx=\int x\frac{d|\psi|^2}{dx}dx=-\int|\psi|^2dx=-1,$$

$$\int\frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx}dx=-\int\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}dx=\frac{1}{\hbar^2}\int\psi^*\hat{p}_x^2\psi dx=\frac{1}{\hbar^2}(\delta p_x)^2,$$

すると，

$$\alpha^2(\delta x)^2-\alpha+\frac{(\delta p_x)^2}{\hbar^2}\geqslant 0$$

が得られる．この（α についての）2次3項式が，α の任意の値に対して正であるためには，この式の判別式が負でなければならない．このことからつぎの不等式が得られる：

$$\delta x\delta p_x\geqslant\frac{\hbar}{2}. \tag{16.7}$$

積の可能な最小値は，かくて $\hbar/2$ に等しい．

この最小値が達成されるのは，次の形の関数で記述される波束の場合である．

$$\psi=\frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\delta x}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0x-\frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right). \tag{16.8}$$

ここで，p_0 と δx は定数である．このような状態で座標がいろいろな値をとる確率は

$$|\psi|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\delta x}\exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right)$$

である．すなわち，座標の原点（平均値 $\bar{x}=0$）のまわりに，標準偏差が δx のガウス分布をしている．

運動量表示の波動関数は

$$a(p_x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ip_xx/\hbar}dx$$

である．この積分を計算すると，つぎの式になる

$$a(p_x)=\mathrm{const}\cdot\exp\left(-\frac{(\delta x)^2(p_x-p_0)^2}{\hbar^2}\right).$$

運動量の値の確率分布，$|a(p_x)|^2$，も標準偏差 $\delta p_x=\hbar/2\delta x$ をもって平均値 $\bar{p}_x=p_0$ のまわりにガウス分布をしている．したがって，積 $\delta p_x\delta x$ はちょうど $\hbar/2$

に等しい.

最後にもう一つ有用な関係式を導いておこう. f と g は二つの物理量であって, それらの演算子は交換則

$$\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}=-i\hbar\hat{c} \tag{16.9}$$

を満たしているとしよう. ここで $\hat{c}$ はある物理量 c の演算子である. この等式の右辺に因子 $\hbar$ を導入したのは, 古典的極限 (すなわち $\hbar\to0$) において, すべての物理量の演算子は一般にその量の掛け算に帰着して, 互いに可換となることに対応している. したがって《準古典的》な場合には第1次近似として式 (16.9) の右辺をゼロに等しいと考えることができる. つぎの近似では演算子 $\hat{c}$ を量 c の単純な積の演算子で置きかえることができる. するとつぎの関係が得られる:

$$\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}=-i\hbar c.$$

この等式は定数 $\hbar$ のかわりに量 $\hbar c$ が入っているところを除けば, 関係式 $\hat{p}_x x-x\hat{p}_x=-i\hbar$ とちょうど同じである[1]. それだから関係式 $\Delta x\Delta p_x\sim\hbar$ との類似から, 準古典的な場合には量 f と g とのあいだに不確定関係

$$\Delta f\Delta g\sim\hbar c \tag{16.10}$$

が成り立つと結論することができる.

たとえば, これらの量の一つがエネルギーであって ($f\equiv H$), もう一つの量 (g) の演算子が時間にあらわに依存しなければ, (9.2) から $c=\dot{g}$ となり, したがって準古典的な場合の不確定関係は

$$\Delta E\Delta g\sim\hbar\dot{g} \tag{16.11}$$

となる.

1)　古典量 c は量 f と g のポアッソン括弧である (33頁の脚注参照).

第3章　シュレーディンガー方程式

§ 17. シュレーディンガー方程式

物理系の波動方程式の形は，系のハミルトニアンによって決定される．このためにハミルトニアンは量子力学のあらゆる数学的方法のうちで基本的な意義を持つ．

自由粒子のハミルトニアンの形は，空間の一様性と等方性およびガリレイの相対性原理に関連した一般的な要請によって，すでに確立されている．古典力学においては，この要請の結果，粒子のエネルギーは粒子の運動量の自乗に依存する．すなわち $E=p^2/2m$，ここで定数 m は粒子の質量と呼ばれる（第Ⅰ巻『力学』§4 参照）．量子力学では同じ要請の結果，（自由粒子に対して）同時に測定可能な保存量であるエネルギーと運動量の固有値の間に同様の関係が得られる．

しかしながら，エネルギーおよび運動量のすべての固有値の間に関係式 $E=p^2/2m$ が成り立つためには，それらの演算子の間に同じ関係式が成り立たなければならない：

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2). \tag{17.1}$$

ここで（15.2）を代入すると，自由に運動している粒子のハミルトニアンが次の形で得られる．

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle. \tag{17.2}$$

ここで $\triangle=\partial^2/\partial x^2+\partial^2/\partial y^2+\partial^2/\partial z^2$ はラプラス演算子である．

互いに相互作用しない粒子からなる系のハミルトニアンは各粒子のハミルトニアンの和に等しい：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_a\frac{\triangle_a}{m_a} \tag{17.3}$$

添字 a は粒子の番号である．$\triangle_a$ は a 番目の粒子の座標に対して微分を行なうラプラス演算子である．

（非相対論的）古典力学では，粒子の相互作用は，粒子の座標の関数である相互作用のポテンシャル・エネルギー $U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)$ をハミルトン関数に加えることによって記述される．量子力学における粒子の相互作用も，系のハミルトニアンに同様の関数を加えることによって記述される[1]．

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_a\frac{\triangle_a}{m_a}+U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots). \tag{17.4}$$

第1項は運動エネルギーの演算子とみなすことができ，第2項はポテンシャル・エネルギーの演算子とみなすことができる．たとえば外場の中に置かれた1個の粒子に対するハミルトニアンは

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+U(x, y, z)=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+U(x, y, z) \tag{17.5}$$

となる．ここで $U(x, y, z)$ は外場の中の粒子のポテンシャル・エネルギーである．

式（17.2)-(17.5）を一般的な方程式（8.1）に代入すると，それぞれ対応する系に対する波動方程式が得られる．ここには外場の中の粒子に対する波動方程式を書いてみよう：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi+U(x, y, z)\Psi. \tag{17.6}$$

定常状態を決める方程式（10.2）は次の形をとる：

$$\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi+[E-U(x, y, z)]\psi=0. \tag{17.7}$$

方程式（17.6),（17.7）は1926年に E. シュレーディンガーによって確立され，**シュレーディンガー方程式**と呼ばれている．

自由粒子に対するシュレーディンガー方程式（17.7）は次の形をとる：

$$\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi+E\psi=0. \tag{17.8}$$

この方程式はエネルギー E の任意の正の値に対して全空間で有限な解をもつ．確定した運動方向をもつ状態に対しては，$E=p^2/2m$ となるような運動量演算

1）この主張はもちろん，量子力学の基本原理の論理的な帰結ではなく，実験結果の帰結と見なさなければならない．

子の固有関数がこれらの解である．このような定常状態の（時間に依存する）全波動関数は次の形をもつ：

$$\Psi=\text{const}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\boldsymbol{pr})} \qquad (17.9)$$

このような関数——**平面波**——はそれぞれ粒子が確定したエネルギーEおよび運動量$\boldsymbol{p}$をもつ状態を記述する．この波の振動数は$E/\hbar$であり，その波動ベクトルは$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}/\hbar$である．対応する波長$\lambda=2\pi\hbar/p$は粒子の**ド・ブロイ波長**と呼ばれている[1]．

このようなわけで自由に運動してる粒子のエネルギー・スペクトルは連続であり，ゼロから$+\infty$まで拡がっていることがわかる．これらの固有値はそれぞれ（$E=0$の値だけを除いて）縮退しており，その縮退度は無限大である．実際，ゼロでないEの各値には，ベクトル$\boldsymbol{p}$の絶対値が等しくて方向が異なる無限個の固有関数（17.9）が対応する．

シュレーディンガー方程式の古典力学への極限移行がどのように行なわれるかを追求するために，簡単のため外場の中のただ一個の粒子を考察しよう．シュレーディンガー方程式（17.6）に波動関数の極限の式（6.1）$\Psi=ae^{iS/\hbar}$を代入し，微分を行なうと次式を得る．

$$a\frac{\partial S}{\partial t}-i\hbar\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{a}{2m}(\nabla S)^2-\frac{i\hbar}{2m}a\triangle S-\frac{i\hbar}{m}\nabla S\nabla a-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle a+Ua=0.$$

この方程式には純実数の項と純虚数の項とがある（Sおよびaは実数であることを想起せよ）．それらを別々にゼロに等しく置くと，次の二つの方程式を得る：

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+U-\frac{\hbar^2}{2ma}\triangle a=0,$$

$$\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{a}{2m}\triangle S+\frac{1}{m}\nabla S\nabla a=0.$$

この第一の方程式で$\hbar^2$を含む項を無視すると

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+U=0 \qquad (17.10)$$

を得る．これは期待したとおり粒子の作用Sに対するハミルトン=ヤコビの古典的方程式である．ちなみに$\hbar\to 0$のとき古典力学は$\hbar$に関して（ゼロ次では

1）粒子に伴う波という概念は1924年にド・ブロイ（L. de Broglie）によって初めて導入された．

なく）1次の項までの精度で成立することがわかる．

得られた第二の方程式は $2a$ を掛けたのち次の形に書きかえることができる：

$$\frac{\partial a^2}{\partial t}+\mathrm{div}\left(a^2\frac{\nabla S}{m}\right)=0. \tag{17.11}$$

この方程式は直観的な物理的意味をもっている．a^2 は空間のある場所に粒子を見いだす確率密度である（$|\Psi|^2=a^2$）；$\nabla S/m=p/m$ は粒子の古典的速度 $\boldsymbol{v}$ である．したがって方程式（17.11）は連続の方程式に他ならず，これは確率密度が各点で古典的速度 $\boldsymbol{v}$ をもちながら古典力学の法則に従って《移動する》ことを示している．

問　　題

ガリレイ変換にともなう波動関数の変換法則を求めよ．

解　粒子の自由運動の波動関数（平面波）に対して変換を行おう．あらゆる関数 Ψ は平面波で展開されるので，任意の波動関数に対する同じ変換法則も同じようにして得られる．

基準系 K および K'（ここで K' は K に対して速度 $\boldsymbol{V}$ で動いている）における平面波はそれぞれ

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{const}\cdot e^{i(\boldsymbol{pr}-Et)/\hbar},\qquad \Psi'(\boldsymbol{r}',t)=\mathrm{const}\cdot e^{i(\boldsymbol{p}'\boldsymbol{r}'-E't)/\hbar}$$

である．ここで $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{V}t$ であり，両系における粒子の運動量とエネルギーは互いに式

$$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'+m\boldsymbol{V},\qquad E=E'+\boldsymbol{V}\boldsymbol{p}'+\frac{mV^2}{2}$$

で結ばれている（第I巻『力学』§8参照）．これらの式を Ψ に代入すると次式を得る：

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\Psi'(\boldsymbol{r}',t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(m\boldsymbol{V}\boldsymbol{r}'+\frac{mV^2}{2}t\right)\right]$$
$$=\Psi'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{V}t,t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(m\boldsymbol{V}\boldsymbol{r}-\frac{mV^2}{2}t\right)\right]. \tag{1}$$

この形ではこの式はもはや粒子の自由運動を特徴づける量を含まず，したがって粒子の任意の状態の波動関数の変換の一般則が得られたことになる．多粒子からなる系に対しては，（1）式の指数関数の引数の中に，粒子に関する和が含まれなければならない．

§18. シュレーディンガー方程式の基本的性質

シュレーディンガー方程式の解が満足すべき条件はきわめて一般的な性質をもっている．まず第一に波動関数は全空間で一価であり，連続でなければならない．連続の要請は，場 $U(x,y,z)$ それ自身が不連続面をもっているような場

合においても保持される．このような表面では波動関数もその導関数もどちらも連続のままでなければならない．ただし導関数の連続性は，もしもある表面を境にしてポテンシャル・エネルギー U が無限大になるならば，成り立たない．$U=\infty$ となる空間領域には，粒子は一般に浸透できない．すなわちこの領域ではいたるところ $\psi=0$ でなければならない．ψ の連続性の要請により，この領域の境界では ψ はゼロとなる．ところが ψ の導関数はこの場合一般的には不連続性を示す．

もしも場 $U(x,y,z)$ がどこでも無限大にならなければ，波動関数もまた全空間で有限でなければならない．この条件は，U がある点で無限大となってもそれがあまり急激ではなく $s<2$ として $1/r^s$ の程度ならばその場合にも守られなければならない（§35 も参照）．

いま $U_{\min}$ を関数 $U(x,y,z)$ の最小値であるとしよう．粒子のハミルトニアンは運動エネルギーの演算子 $\hat{T}$ およびポテンシャル・エネルギーの二つの項の和であるので，任意の状態にあるエネルギーの平均値は和 $\bar{E}=\overline{T}+\overline{U}$ に等しい．ところが（自由粒子のハミルトニアンに等しい）演算子 $\hat{T}$ のすべての固有値は正である；それゆえ平均値も $\overline{T}\geqq 0$ となる．明らかに成り立つ不等式 $\overline{U}>U_{\min}$ を考慮すれば，$\bar{E}>U_{\min}$ であることがわかる．この不等式は任意の状態に対しても成り立つので，またあらゆるエネルギー固有値に対して成り立つことも明らかである：

$$E_n>U_{\min}. \tag{18.1}$$

無限遠で消失する力の場の中を運動する粒子を考えよう；ふつうよくやるように関数 $U(x,y,z)$ は無限遠でゼロとなるように定義する．すると容易にわかるように負のエネルギー固有値のスペクトルは離散的である．つまり無限遠で消失する場の中の $E<0$ なる状態はすべて束縛状態である．実際，無限運動に対応する連続スペクトルの定常状態では，粒子は無限遠でも見いだされる（§10 参照）．ところが十分に大きな距離では，場の存在を無視することができて粒子の運動は自由であると考えることができる；運動が自由であればエネルギーは正となる他はない．

これに対して，正の固有値は連続スペクトルを形成し無限運動に対応する；$E>0$ のときはシュレーディンガー方程式は，（いま考えているような場の中で

は）積分 $\int|\Psi|^2dV$ の収束するような解を一般にはもたない[1].

量子力学では有界運動をする粒子は $E<U$ なる空間領域にも見いだされることに注目しよう．粒子の存在確率 $|\psi|^2$ はこのような領域の奥に向かって急速にゼロになるが，有限な深さである限りそれは完全にはゼロではない．この点で古典力学とは原理的に異なっている．古典力学では粒子は一般に $U>E$ の領域に侵入することはできない．古典力学でこの領域に侵入することができないのは，$E<U$ で運動エネルギーが負になること，つまり速度が虚数になるからである．量子力学においても運動エネルギーの固有値は正である．それにもかかわらずここでは矛盾が起こらないのである．それはもしも測定過程によって粒子が空間のある一定点に局在化されるならば，この測定過程の結果として粒子の状態は乱されて，粒子は一般にいかなる確定した運動エネルギーももたなくなるからである．

もしも，全空間で $U(x,y,z)>0$（しかも無限遠で $U\to 0$）であるならば，不等式（18.1）により $E_n>0$ となる．他方 $E>0$ であるとスペクトルは連続でなければならないので，この場合には一般に離散スペクトルは存在せず，粒子の無限運動のみが可能であると結論できる．

さてある点（それを座標の原点に選ぶことにする）で U が法則

$$U\approx-\frac{\alpha}{r^s}\quad(\alpha>0)\tag{18.2}$$

に従って $-\infty$ になると仮定しよう．座標原点の回りの（半径が r_0 の）ある小さい領域で有限，その外ではゼロに等しい波動関数を考えよう．このような波束の中の粒子の座標の値の不確定さは r_0 の程度である．したがって運動量の値の不確定さは $\sim\hbar/r_0$ である．この状態での運動エネルギーの平均値は $\hbar^2/mr_0^2$ の程度であり，ポテンシャル・エネルギーの平均値は $-\alpha/r_0^s$ の程度である．まず最初に $s>2$ であると仮定しよう．すると和

$$\frac{\hbar^2}{mr_0^2}-\frac{\alpha}{r_0^s}$$

は r_0 が十分に小さければ絶対値でいくらでも大きい負の値をとることができ

1）しかし，純粋に数学的に見れば，（物理的には意味のない）ある特定の形の関数 $U(x,y,z)$ のときに，連続スペクトルのうちからいくつかの離散的な値が脱落することがあることを断わっておかなければならない．

る．ところがもしも平均エネルギーがそのような値をとることができるならば，それはかならず絶対値でいくらでも大きい負のエネルギー固有値が存在することを意味する．大きな $|E|$ をもつエネルギー準位に対応するのは，座標原点のまわりの非常に狭い空間領域内の粒子の運動である．《基底》状態はちょうど座標原点にある粒子に対応する．すなわち粒子は点 $r=0$ に《落下》する．

これに反しもしも $s<2$ であれば，エネルギーは絶対値でいくらでも大きい負の値をとることはできない．離散的なスペクトルはある有限の負の値から始まる．この場合には中心への粒子の落下は起こらない．古典力学では中心への粒子の落下はあらゆる引力の場において（すなわち任意の正の s に対して）原理的に可能であることに注意すべきである．$s=2$ の場合は § 35 で特別に考察するとしよう．

次にエネルギー・スペクトルの性質が遠距離における場の振舞いにどう依存しているかを研究しよう．いまポテンシャル・エネルギーは負であって $r\to\infty$ のときベキ法則 (18.2) に従ってゼロになると仮定しよう（こんどはこの式で r は大きいとする）．大きな半径 r_0 と厚さ $\Delta r\ll r_0$ の球殻を《満たす》波束を考えよう．すると運動エネルギーの大きさの程度はふたたび $\hbar^2/m(\Delta r)^2$ となり，ポテンシャル・エネルギーの大きさの程度は $-\alpha/r_0^s$ となる．r_0 を増加させ，またそれと同時に Δr も増加させることにする（r_0 に比例して Δr を増加させる）．もしも $s<2$ であるとすると，十分に大きな r_0 で和 $\hbar^2/m(\Delta r)^2-\alpha/r_0^s$ は負になる．このことから粒子が座標原点から遠い距離でもかなりの確率で見いだされるような負のエネルギーをもつ定常状態が存在することがわかる．このことは同時に絶対値でいくらでも小さい負のエネルギー準位が存在することを意味している（ここで $U>E$ なる空間領域で波動関数は急速に消滅することを思い起こすべきである）．したがってこの場合に離散スペクトルは $E=0$ の準位に近づくにつれて濃密になる無限個の準位を含んでいる．

これに反しもしも場が無限遠で $1/r^s$ $(s>2)$ に従って減少してゆけば，絶対値のいくらでも小さい負の準位は存在しない．離散スペクトルはゼロでない絶対値をもつ準位で終わり，したがって準位の総数は有限である．

定常状態の波動関数に対するシュレーディンガー方程式は実であり，その解

に課される条件も実である．したがってその解はつねに実に選ぶことができる[1]．エネルギーの縮退していない固有関数についていえば，重要でない位相因子を除いてそれらは自動的に実となる．実際 ψ^* と ψ とは同じ方程式を満足し，したがってまた同じエネルギーの値に対する固有関数である；このためもしもこの値が縮退していなければ，ψ と ψ^* は本質的に同等でなければならない．すなわちそれらは（絶対値が1に等しい）定数因子が異なるだけである．縮退したエネルギー準位に対応する波動関数は必ずしも実ではないが，それらの線形結合を適当にとることによりいつも実の関数の組を得ることができる．

（時間に依存する）全波動関数 Ψ はその係数の中に i を含む方程式によって決められる．しかしこの方程式は，もしもその中で t を $-t$ に変え同時に複素共役に移せば[2]，その形を保存する．したがって Ψ と Ψ^* の違いが時間の符号だけであるように関数 Ψ を常に選ぶことができる．

よく知られているように古典力学の方程式は**時間反転**すなわち時間の符号の変化に関して不変である．すでに見たように量子力学における時間の二つの方向に関する対称性は，時間の符号を変えると同時に Ψ を Ψ^* に置きかえても波動方程式が不変であるということに示されている．しかしこの場合この対称性はただ方程式に関するものであって，量子力学で基本的な役割を演じている測定の概念それ自体に関するものではないことを想起すべきである（これについては§7で詳論した）．

§19. 流れの密度

古典力学では粒子の速度 $\boldsymbol{v}$ はその運動量と $\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$ の関係で結ばれている．量子力学においても期待どおり，対応する演算子のあいだに同じ関係が成り立つ．このことは演算子 $\hat{\boldsymbol{v}}\equiv\dot{\hat{\boldsymbol{r}}}$ を，演算子の時間に関する微分をあらわす一般式 (9.2)：

$$\hat{\boldsymbol{v}}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{\boldsymbol{r}}-\hat{\boldsymbol{r}}\hat{H})$$

によって計算すれば容易に確かめられる．$\hat{H}$ をあらわす式 (17.5) および公式

1）ここでいっていることは磁場の中にある系に対しては成り立たない（第15章参照）

2）ポテンシャル・エネルギー U は時間にあらわに依存しないことを仮定している．この系は閉じているか，あるいは一定の（磁場でない）場の中にあるかどちらかである．

(16.5) を用いて

$$\hat{v}=\frac{\hat{p}}{m} \tag{19.1}$$

が得られる．同じ関係が速度と運動量の固有値のあいだにも，また任意の状態にあるそれらの量の平均値のあいだにも成り立つことは明らかである．

粒子の速度は運動量と同様に，その座標と同時に確定値をもつことはできない．しかし速度に時間の無限小要素 dt を掛けたものは，時間 dt のあいだの粒子の移動を与える．したがって速度と座標が同時に存在しないということは，粒子がある時刻に空間の定点にあったとき，それにつづく無限に近い時刻においてもすでにその粒子は定まった位置をもたないことを意味する．

粒子の動径ベクトルの関数である量 $f(\boldsymbol{r})$ の時間に関する導関数演算子 $\hat{\dot{f}}$ に対する有用な公式に触れておこう．f が $U(\boldsymbol{r})$ と可換であることを考慮して

$$\hat{\dot{f}}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}f-f\hat{H})=\frac{i}{2m\hbar}(\hat{\boldsymbol{p}}^2f-f\hat{\boldsymbol{p}}^2)$$

となる．(16.4) を用いて次のように書くことができる

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2f=\hat{\boldsymbol{p}}(f\hat{\boldsymbol{p}}-i\hbar\nabla f),\qquad f\hat{\boldsymbol{p}}^2=(\hat{\boldsymbol{p}}f+i\hbar\nabla f)\hat{\boldsymbol{p}}$$

したがって，求める表式は次のようになる：

$$\hat{\dot{f}}=\frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{p}}\nabla f+\nabla f\cdot\hat{\boldsymbol{p}}). \tag{19.2}$$

つぎに加速度の演算子をつくろう．次の式が得られる：

$$\hat{\dot{\boldsymbol{v}}}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{\boldsymbol{v}}-\hat{\boldsymbol{v}}\hat{H})=\frac{i}{m\hbar}(\hat{H}\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\hat{H})=\frac{i}{m\hbar}(U\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}U)$$

式 (16.4) を用いて，次式を得る：

$$m\hat{\dot{\boldsymbol{v}}}=-\nabla U. \tag{19.3}$$

この演算子方程式は古典力学の運動方程式（ニュートンの方程式）と形が正確に一致している．

ある有限な体積 V にわたる積分 $\int|\Psi|^2dV$ は，この体積の中に粒子の見いだされる確率をあらわす．この量の時間に関する微分を計算しよう．それは

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi|^2dV=\int\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)dV=\frac{i}{\hbar}\int(\Psi\hat{H}^*\Psi^*-\Psi^*\hat{H}\Psi)dV$$

となる．ここに

$$\hat{H}=\hat{H}^*=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+U(x,y,z)$$

を代入し，恒等式

$$\Psi\triangle\Psi^*-\Psi^*\triangle\Psi=\mathrm{div}\,(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)$$

を用いると

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi|^2dV=-\int\mathrm{div}\,\boldsymbol{j}dV$$

を得る．ここで $\boldsymbol{j}$ はベクトル

$$\boldsymbol{j}=\frac{i\hbar}{2m}(\Psi\,\mathrm{grad}\,\Psi^*-\Psi^*\,\mathrm{grad}\,\Psi)=\frac{1}{2m}(\Psi\hat{\boldsymbol{p}}^*\Psi^*+\Psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\Psi)\quad(19.4)$$

をあらわす[1]．ガウスの定理により $\mathrm{div}\,\boldsymbol{j}$ の積分は，体質 V を囲む閉じた表面上の積分に変換される．

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi|^2dV=-\oint\boldsymbol{j}d\boldsymbol{f}.\quad(19.5)$$

これからわかるようにベクトル $\boldsymbol{j}$ は**確率の流れの密度ベクトル**あるいは単に**流れの密度**と呼ぶことができる．このベクトルを表面上で積分したものは，単位時間に粒子がこの表面を通り抜ける確率を与える．ベクトル $\boldsymbol{j}$ および確率密度 $|\Psi|^2$ は方程式

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}+\mathrm{div}\,\boldsymbol{j}=0\quad(19.6)$$

を満足しているが，これは古典的な連続の方程式と同じである．

自由運動の波動関数——平面波 (17.9)——は，1 に等しい密度をもつ粒子の流れを記述するように規格化することができる（これは，その横断面の単位面積を，単位時間あたり平均して 1 個の粒子が通過するような流れである）．このような関数は

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{v}}e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\boldsymbol{pr})}\quad(19.7)$$

である．ここで v は粒子の速度である．実際にこれを (19.4) に代入すると，$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{p}/mv$ を得る．これは運動方向の単位ベクトルである．

---

1) もし Ψ を $|\Psi|e^{i\alpha}$ の形にあらわすならば

$$j=\frac{\hbar}{m}|\Psi|^2\,\mathrm{grad}\,\alpha.\quad(19.4a)$$

異なるエネルギーをもつ状態の波動関数相互の直交性をシュレーディンガー方程式から直接に導く方法を示すのは有益である．いま ψ_m および ψ_n を二つのこのような関数であるとする．それらは次の方程式を満足する：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi_m+U\psi_m=E_m\psi_m,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi_n^*+U\psi_n^*=E_n\psi_n^*.$$

この第一の式には ψ_n^* を掛け，第二の式には ψ_m を掛けて，互いに項ごとに差し引く．その結果は

$$(E_m-E_n)\psi_m\psi_n^*=\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_m\triangle\psi_n^*-\psi_n^*\triangle\psi_m)$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\operatorname{div}(\psi_m\nabla\psi_n^*-\psi_n^*\nabla\psi_m)$$

となる．ここで方程式の両辺を全空間にわたって積分すると，右辺はガウスの定理により変形されてゼロとなり，結局

$$(E_m-E_n)\int\psi_m\psi_n^*dV=0$$

を得る．これから仮定 $E_m\neq E_n$ により，求める直交関係

$$\int\psi_m\psi_n^*dV=0$$

が導かれる．

§ 20. 変分原理

シュレーディンガー方程式の一般形 $\hat{H}\psi=E\psi$ は変分原理

$$\delta\int\psi^*(\hat{H}-E)\psi dq=0 \qquad (20.1)$$

から導くことができる．ψ は複素関数であるため ψ および ψ^* に関する変分は独立に実行できる．ψ^* に関する変分をとると

$$\int\delta\psi^*(\hat{H}-E)\psi dq=0$$

となる．$\delta\psi^*$ は任意であるからこれから求める方程式 $\hat{H}\psi=E\psi$ が得られる．ψ に関する変分をとっても別に新しい結果は得られない．実際 ψ に関する変分をとり，演算子 $\hat{H}$ のエルミート性を用いると

$$\int\psi^*(\hat{H}-E)\delta\psi dq=\int\delta\psi(\hat{H}^*-E)\psi^* dq=0$$

となるが，これからは複素共役な方程式 $\hat{H}^*\psi^*=E\psi^*$ が得られるだけである．

変分原理（20.1）はこの積分の条件なしの極値を要求している．これはまた別の形にあらわすことができる．すなわちEをラグランジュの未定係数とみなし，条件付きの極値

$$\delta\int\psi^*\hat{H}\psi dq=0 \tag{20.2}$$

を付加条件

$$\int\psi\psi^* dq=1 \tag{20.3}$$

の下で求める問題とみることができる．

（付加条件（20.3）の下での）積分（20.2）の極小値は，最初のエネルギー固有値すなわち基底状態のエネルギー E_0 である．この極小を実現する関数 ψ は基底状態の波動関数 ψ_0 である[1]．それに続く定常状態の波動関数 ψ_n $(n>0)$ には積分の極値が対応するだけであって，真の極小は対応しない．

積分（20.2）の極小条件から基底状態のつぎにくる波動関数 ψ_1 およびエネルギー E_1 を求めるためには，変分関数 ψ として規格化条件（20.3）の他に基底状態の波動関数 ψ_0 に対する直交条件 $\int\psi\psi_0 dq=0$ を満たすものだけを許すべきである．一般に，最初の n 個の状態の波動関数 $\psi_0, \psi_1, \cdots, \psi_{n-1}$（これらの状態はそのエネルギーの増加する順序に配列されている）がわかっているとき，それにつづく状態の波動関数は付加条件

$$\int\psi^2 dq=1, \quad \int\psi\psi_m dq=0, \quad m=0,1,2,\cdots,n-1 \tag{20.4}$$

の下で積分（20.2）を極小にしている．

ここで変分原理に基づいて証明することができるいくつかの一般的な定理[2]

1）以下この節では波動関数 ψ を実であると考える．（もしも磁場がなければ）いつもそのように波動関数を選ぶことができる．

2）固有関数のゼロ点に関する定理の証明は次の教科書にある（また次節も参照せよ）．M. A. Лаврентьев と Л. А. Люстерник, Курс вариационного исчисления（変分法入門），第2版，第9章，国立工学書出版所，1950；R. Courant と D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, 第1巻，第6章，Intersciences, New York, 1953.［ドイツ語版よりの邦訳：斎藤利弥監訳《数理物理学の方法》第2巻（東京図書）］.

を導こう．

基底状態の波動関数 ψ_0 は座標の有限の値に対してゼロになることはない（あるいは，節をもたないといってもよい）[1]．いいかえればこの関数は全空間で同じ符号をもつ．このことから ψ_0 と直交する他の定常状態の波動関数 ψ_n $(n>0)$ は必ず節点をもつことが導かれる（もしも ψ_n が定符号とすると，積分 $\int\psi_0\psi_n dq$ はゼロになることができない）．

さらに ψ_0 に節が存在しないことから，最低エネルギー準位は縮退できないことが導かれる．いま逆の仮定をして ψ_0, ψ_0' が準位 E_0 に対応する二つの異なる固有関数であるとしてみよう．するとあらゆる線形結合 $c\psi_0+c'\psi_0'$ もまた固有関数であるだろう．しかし定数 c, c' を適当に選ぶと，必ず空間の任意の与えられた点でこの関数をゼロにすることができる．すなわちわれわれは節をもつ固有関数を得てしまうのである．

もしも運動が空間の限られた領域で行なわれるとすると，この領域の境界上では $\psi=0$ でなければならない（§ 18 参照）．エネルギー準位を決定するためには変分原理によりこの境界条件の下で積分の極小（20.2）を求める必要がある．基底状態の波動関数には節が存在しないという定理により，ψ_0 はこの領域の内部ではゼロになることはない．

運動の領域の広さが増大すると，すべてのエネルギー準位 E_n は減少することがわかる．このことは，領域が拡大するにつれ積分の極小を実現するための変分関数の選択範囲が増加し，その結果として積分の極小値は減少する一方となることからただちに導かれる．

粒子系の離散スペクトルの状態に対する式

$$\int\psi\hat{H}\psi dq=\int\left[-\sum_a\frac{\hbar^2}{2m_a}\psi\triangle_a\psi+U\psi^2\right]dq$$

は実際の変分計算にもっと適した別の形に書きかえることができる．被積分関数の第一項は，つぎのように書くことができる：

$$\psi\triangle_a\psi=\mathrm{div}_a\,(\psi\nabla_a\psi)-(\nabla_a\psi)^2.$$

$\mathrm{div}_a\,(\psi\nabla_a\psi)$ の V_a に関する積分は，無限に遠い閉曲面上の積分に変換され，

1）一般的にいって，この定理（およびそれから導かれる結果）はいくつかの同種粒子からなる系の波動関数に対しては成り立たない（§ 63 の終わりの脚注を参照）．

離散スペクトルの状態の波動関数は無限遠で十分はやくゼロに収束するので，この積分はゼロとなる．したがって

$$\int\psi\hat{H}\psi dq=\int\left[\sum_a\frac{\hbar^2}{2m_a}(\nabla_a\psi)^2+U\psi^2\right]dq \tag{20.5}$$

を得る．

§ 21.　1次元運動の一般的性質

もしも粒子のポテンシャル・エネルギーが一つの座標 (x) にのみ依存するとすると，波動関数は y, z の関数と x のみの関数の積の形で求めることができる．これらの関数のうちの前者は自由運動のシュレーディンガー方程式によって決定され，後者は1次元のシュレーディンガー方程式

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(x)]\psi=0 \tag{21.1}$$

によって決定される．このような1次元の方程式に還元できる問題は，一つの座標のみに依存する関数の和に分解されるポテンシャル・エネルギー $U(x, y, z)=U_1(x)+U_2(y)+U_3(z)$ の場の中の運動であることは明らかである．§§ 22–24 でわれわれはこのような《1次元》運動の具体例をいくつか考察するが，ここでは準備としてその一般的性質をいくつか示すことにしよう．

まずはじめに，1次元問題では離散スペクトルのあらゆるエネルギー準位は縮退していないことを示そう．これを証明するために逆のことを仮定し，ψ_1 と ψ_2 は同一のエネルギー値に対応する二つの異なる固有関数であるとする．それらはともに同一の方程式（21.1）を満足するので，次式を得る：

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1}=\frac{2m}{\hbar^2}(U-E)=\frac{\psi_2''}{\psi_2}.$$

あるいは $\psi_1''\psi_2-\psi_2''\psi_1=0$（ダッシュは x に関する微分を意味する）．この関係を積分すると

$$\psi_1'\psi_2-\psi_1\psi_2'=\text{const} \tag{21.2}$$

を得る．無限遠では $\psi_1=\psi_2=0$ なので const はゼロとなり，したがって

$$\psi_1\psi_2'-\psi_2\psi_1'=0$$

あるいは $\psi_1'/\psi_1=\psi_2'/\psi_2$ となる．もう一度積分すると $\psi_1=\text{const}\cdot\psi_2$ となり，結

局二つの関数は本質的には同一ということになる.

離散スペクトルの波動関数 $\psi_n(x)$ に対しては次に述べるような定理（いわゆる**振動定理**）がある：$n+1$ 番目に大きい固有値 E_n に対応する関数 $\psi_n(x)$ は（x が有限な値のところで）n 回ゼロとなる[1].

関数 $U(x)$ は $x\to\pm\infty$ で有限の極限値に収束するとしよう（しかし単調関数である必要はない）. 極限値 $U(+\infty)$ をエネルギーの原点にとり（つまり $U(+\infty)=0$ と仮定する），そして $U(-\infty)$ を U_0 であらわして，$U_0>0$ であるとしよう. 離散スペクトルは，粒子が無限遠に飛び去ることができないようなエネルギー値の範囲にある. そのためにはエネルギーは両極限値 $U(\pm\infty)$ よりも小さくなければならない. つまりエネルギーは負でなければならない：

$$E<0. \tag{21.3}$$

しかもあらゆる場合に $E>U_{\min}$ でなければならないことはもちろんである. つまり関数 $U(x)$ は $U_{\min}<0$ なる極小値を少なくとも一つはもたなければならない.

さてエネルギーの値が U_0 よりは小さいが正である範囲

$$0<E<U_0 \tag{21.4}$$

を考えよう. この範囲ではスペクトルは連続で，それに対応する定常状態にある粒子の運動は有界ではなく，粒子は $x=+\infty$ の側へ飛び去る. 容易にわかるようにスペクトルのこの範囲にあるどのエネルギー固有値もやはり縮退していない. それを見るには，さきに（離散スペクトルに対して）用いた証明は，関数 ψ_1, ψ_2 が無限遠の片方だけでゼロとなる場合にもあてはまることに注意すれば十分である（いまの場合は $x\to-\infty$ でこれらの関数がゼロとなる）.

シュレーディンガー方程式（21.1）の中では十分に大きな正の値の x に対して $U(x)$ を無視することができる：

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0.$$

この方程式は次のような《定在平面波》の形をした実解をもっている：

$$\psi=a\cos(kx+\delta). \tag{21.5}$$

1） もしも粒子が x 軸の有限の区間だけに見いだされるならば，関数 $\psi_n(x)$ のこの区間内のゼロ点を数えるべきである.

ここで a, δ は定数で，《波動ベクトル》は $k=p/\hbar=\sqrt{2mE}/\hbar$ である．この式により，(21.4) の範囲にある連続スペクトルのうちの縮退のないエネルギー準位の波動関数の ($x\to+\infty$ での) 漸近形が決定される．x が負の大きな値をとるとシュレーディンガー方程式は

$$\psi''-\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)\psi=0$$

となる．$x\to-\infty$ で無限大に発散しない解は

$$\psi=be^{\kappa x},\qquad \kappa=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)} \tag{21.6}$$

である．これは $x\to-\infty$ における波動関数の漸近形である．したがって波動関数は $E<U$ なる範囲に入ると指数関数的に減衰する．

最後に

$$E>U_0 \tag{21.7}$$

のときはスペクトルは連続であり，運動は両側で無限遠におよんでいる．スペクトルのこの範囲では，すべての準位は二重に縮退している．このことは次のことから導かれる：対応する波動関数は2階の微分方程式 (21.1) によって決定され，またこの方程式の二つの独立解はどちらも無限遠での必要条件を満足している (ところがたとえばさきに述べた場合では，独立解のうちの一つは $x\to-\infty$ で無限大に発散するので採用されなかった)．$x\to+\infty$ での波動関数の漸近形は

$$\psi=a_1e^{ikx}+a_2e^{-ikx} \tag{21.8}$$

であり，$x\to-\infty$ でも類似の式ができる．e^{ikx} の項は右へ運動する粒子に対応しており，e^{-ikx} の項は左へ運動する粒子に対応している．

関数 $U(x)$ は偶関数であると仮定しよう [$U(-x)=U(x)$]．すると座標の符号を変えてもシュレーディンガー方程式 (21.1) は変わらない．このことからもしも $\psi(x)$ がこの方程式のある解であるとすると，$\psi(-x)$ もまた $\psi(x)$ と定数因子が異なるだけの解である：$\psi(-x)=c\psi(x)$．もう一度 x の符号を変えると，$\psi(x)=c^2\psi(x)$ を得る．これから $c=\pm1$．したがって (点 $x=0$ に関して) 対称なポテンシャル・エネルギーであれば，定常状態の波動関数は偶 [$\psi(-x)$

$=\psi(x)$] か奇 [$\psi(-x)=-\psi(x)$] のどちらかである[1]．とくに基底状態の波動関数は偶関数である：この波動関数は節をもつことができないのに奇関数はどんなものでも $x=0$ でゼロとなる [$\psi(0)=-\psi(0)=0$] からである．

（連続スペクトルの範囲の）1次元運動の波動関数を規格化するためには，$|x|$ の大きな値に対する波動関数の漸近形から直接に規格化定数を決定する簡単な方法がある．

片側（$x\to+\infty$）に無限運動をする波動関数を考察しよう．規格化積分は $x\to\infty$ で発散する（$x\to-\infty$ では関数は指数関数的に減衰し，したがって積分は急速に収束する）．そこで規格化定数を決定する場合には，ψ を（大きな $x>0$ のところの）それの漸近値に置きかえることができて，さらに積分の下限として任意の有限な値 x，たとえばゼロを選んで積分を行なうことができる；これは無限大の量に比較して有限の量を無視することである．条件

$$\int\psi_p^*\psi_{p'}\,dx=\delta\left(\frac{p-p'}{2\pi\hbar}\right)=2\pi\hbar\delta(p-p') \tag{21.9}$$

によって規格化される波動関数（p は無限遠における粒子の運動量）は，係数 $a=2$ をもつ (21.5) の形の漸近形，つまり

$$\psi_p\approx 2\cos(kx+\delta)=e^{i(kx+\delta)}+e^{-i(kx+\delta)} \tag{21.10}$$

をもたなければならないことを示そう．

われわれは異なる p に対応する関数相互の直交性を証明するつもりはないので，関数 (21.10) を規格化積分に代入するとき運動量 p と p' はどんなに近接してもよいと考えることにしよう；したがって $\delta=\delta'$ と置くことができる（δ は一般に p の関数である）．さらに被積分関数のうちで $p=p'$ で発散する項だけを残そう；いいかえると $e^{\pm i(k+k')x}$ なる因子を含む項は無視しよう．したがって次式を得る

$$\int\psi_p^*\psi_{p'}\,dx=\int_0^\infty e^{i(k'-k)x}dx+\int_0^\infty e^{-i(k'-k)x}dx=\int_{-\infty}^\infty e^{i(k'-k)x}dx.$$

これは (15.7) により (21.9) と一致する．

---

1) この議論では定常状態は縮退していないこと，つまり両側で無限遠にいかないことを仮定している．さもないと，x の符号を変えたとき，与えられたエネルギー準位に属する二つの波動関数は相互に変換することができる．ところがこの場合，定常状態の波動関数は必ずしも偶関数あるいは奇関数であるとは限らないが，（もとの波動関数の適当な線形結合を選ぶことにより）いつでも偶関数あるいは奇関数にすることができる．

エネルギーの δ–関数による規格化は，(5.14) により ψ_p に

$$\left(\frac{d(p/2\pi\hbar)}{dE}\right)^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}}$$

を掛けることによって得られる．ここで v は無限遠における粒子の速度である．したがって

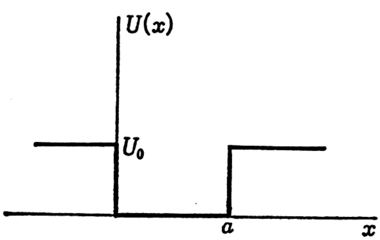
$$\psi_E=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}}\psi_p=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}}(e^{i(kx+\delta)}+e^{-i(kx+\delta)}). \qquad (21.11)$$

定在波 (21.11) が分解される二つの進行波の各々における流れの密度は $1/2\pi\hbar$ であることに気がつく．したがって片側に無限運動をする波動関数をエネルギーの δ–関数を用いて規格化するための次のような規則を定式化することができる：波動関数の漸近形を二つの反対方向に進む平面波の和であらわすとき，座標の原点に近づく方向（または座標の原点から離れる方向）に進む波の流れの密度が $1/2\pi\hbar$ となるように，規格化の係数を選ばなければならない．

同様にして，両側に無限運動をする波動関数の規格化に関しても同じような規則を得ることができる．もしも座標の原点方向に x 軸の正および負の側から進む波の流れの和が $1/2\pi\hbar$ に等しければ，波動関数はエネルギーの δ–関数によって規格化されている．

§ 22. ポテンシャルの井戸

1次元運動の簡単な例として，垂直なポテンシャルの井戸の中の運動，つまり第1図に示す関数 $U(x)$ の場の中の運動を研究しよう：すなわち $0<x<a$ で $U(x)=0$，$x<0$，$x>a$ で $U(x)=U_0$ とする．すでに明らかなように，$E<U_0$ ではスペクトルは離散的であり，$E>U_0$ では二重に縮退した連続スペクトルの準位が得られる．



第 1 図

$0<x<a$ の領域でシュレーディンガー方程式は

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \qquad (22.1)$$

となり（ダッシュ記号は x についての微分をあらわす)，井戸の外の領域で

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0 \tag{22.2}$$

となる．$x=0$，a においてこれらの方程式の解は互いに連続に移行し，同時にその導関数も連続である．また $x=\pm\infty$ における方程式（22.2）の解は有限にとどまらなければならない（$E<U_0$ の離散スペクトルのときはゼロとなる）．

$E<U_0$ のとき無限遠でゼロとなる方程式（22.2）の解は

$$\psi = \text{const}\cdot e^{\mp\kappa x}, \qquad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \tag{22.3}$$

である．（指数関数の肩にある $-$ および $+$ の記号は，それぞれ $x>a$ および $x<0$ の領域に対応している）．粒子を見いだす確率 $|\psi|^2$ は $E<U(x)$ である領域の奥に進むに従い指数関数的に減少する．ポテンシャルの井戸の境界における ψ と ψ' の連続性のかわりに ψ および対数微分 ψ'/ψ の連続性を要求すると便利である．（22.3）を考慮すれば次の形の境界条件を得る：

$$\frac{\psi'}{\psi} = \mp\kappa. \tag{22.4}$$

ここでは任意の深さ U_0 の井戸の中のエネルギー準位を決めること（問題２参照）には立ち入らないで，無限に高い壁（$U_0\to\infty$）の極限の場合だけを十分に研究することにしよう．

$U_0=\infty$ のとき運動は二点 $x=0$，a によって区切られた範囲のみで起こる．そして§18で示されたように，この二点における境界条件は

$$\psi = 0 \tag{22.5}$$

でなければならない［容易にわかるように，この条件は一般的な条件（22.4）からも得られる．実際 $U_0\to\infty$ となれば $\kappa\to\infty$ が得られ，したがって $\psi'/\psi\to\infty$ となる．ところが ψ' は無限大になることはできないので，これから $\psi=0$ を得る］．井戸の中で方程式（22.1）の解は次の形に求められる：

$$\psi = c\sin(kx+\delta), \qquad \kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{22.6}$$

$x=0$ における条件 $\psi=0$ は $\delta=0$ を与え，さらに $x=a$ における同じ条件は $\sin ka=0$ を与える．これから $ka=n\pi$（n は１から始まる正の整数[1]）が導かれる．あるいは

1）$n=0$ ならば恒等的に $\psi=0$ となる．

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \qquad n=1, 2, 3, \cdots \tag{22.7}$$

を得る．これがポテンシャルの井戸の中での粒子のエネルギー準位を与える．定常状態の規格化された波動関数は

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}x \tag{22.8}$$

である．

これらの結果に基づいて，直方体の《ポテンシャルの箱》の中の粒子，すなわち $0<x<a$, $0<y<b$, $0<z<c$ の中で $U=0$，この領域外で $U=\infty$ であるポテンシャル・エネルギーの場の中での3次元運動に対するエネルギー準位をただちに書き下すことができる．すなわちこれらの準位は次の和であらわされる：

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right), \quad n_1, n_2, n_3=1, 2, 3, \cdots. \tag{22.9}$$

またこれらに対応する波動関数は次の積で与えられる：

$$\psi_{n_1n_2n_3}=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{\pi n_1}{a}x\cdot\sin\frac{\pi n_2}{b}y\cdot\sin\frac{\pi n_3}{c}z. \tag{22.10}$$

基底状態のエネルギーは (22.7) または (22.9) により $E_0\sim\hbar^2/ml^2$ の程度であることがわかる．ここで l は粒子の運動の領域の1次元的な大きさである．この結果は不確定関係と一致している．すなわち座標の不確定さが $\sim l$ の程度であると，運動量の不確定さならびに運動量自身の値の程度は $\sim\hbar/l$ であり，これに対応するエネルギーは $\sim(\hbar/l)^2/m$ となるからである．

問　　題

1. 無限に深い垂直なポテンシャルの井戸の中にある粒子の基底状態について，運動量のいろいろな値の確率分布を求めよ．

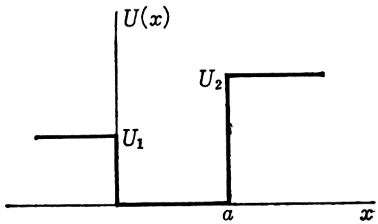
解　運動量の固有関数による関数 ψ_1 (22.8) の展開係数 $a(p)$ は

$$a(p)=\int\psi_p^*\psi_1dx=\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx$$

である．この積分を計算し絶対値の自乗をとると，求める確率分布が得られる．

$$|a(p)|^2\frac{dp}{2\pi\hbar}=\frac{4\pi\hbar^3a}{(p^2a^2-\pi^2\hbar^2)^2}\cos^2\frac{pa}{2\hbar}dp.$$

2. 第2図に示されたポテンシャルの井戸に対するエネルギー準位を求めよ．



第 2 図

解　$E<U_1$ のときエネルギー・スペクトルは離散的であるが，この場合をわれわれは考察しよう．$x<0$ の領域で波動関数は

$$\psi=c_1e^{\kappa_1 x},\qquad \kappa_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_1-E)}.$$

また $x>a$ の領域では

$$\psi=c_2e^{-\kappa_2 x},\qquad \kappa_2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_2-E)}$$

である．井戸の中 $(0<x<a)$ では，ψ は次の形に求められる：

$$\psi=c\sin(kx+\delta),\qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

井戸の境界における ψ'/ψ の連続条件から次の方程式を得る：

$$k\cot\delta=\kappa_1=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_1-k^2},$$

$$k\cot(ak+\delta)=-\kappa_2=-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_2-k^2}.$$

または

$$\sin\delta=\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_1}},\qquad \sin(ka+\delta)=-\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_2}}.$$

δ を消去すれば，次の超越方程式を得る：

$$ka=n\pi-\sin^{-1}\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_1}}-\sin^{-1}\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_2}} \tag{1}$$

(ここで $n=1, 2, 3, \cdots$，また $\sin^{-1}$ は 0 と $\pi/2$ のあいだの値をとるものとする)．この超越方程式の根がエネルギー準位 $E=\hbar^2k^2/2m$ を決定する．一般に各 n に対して一つの根が存在する；n の値は準位が高くなる順序の番号になっている．

$\sin^{-1}$ の引数は 1 を越えることはできないので，k の値は 0 と $\sqrt{2mU_1}/\hbar$ のあいだの範囲にしかないことは明らかである．方程式 (1) の左辺は k について単調増大関数であり，右辺は単調減少関数である．このため方程式(1)の根が存在するためには，$k=\sqrt{2mU_1}/\hbar$ で右辺は左辺よりも小さくなることが必要である．特に $n=1$ と置いて得られる不等式

$$a\frac{\sqrt{2mU_1}}{\hbar}\geqq\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\sqrt{\frac{U_1}{U_2}} \tag{2}$$

は井戸の中に少なくとも一つのエネルギー準位が存在するための条件である．$U_1\neq U_2$ の場合には離散的エネルギー準位が一つも存在しないような十分に小さい井戸の幅 a がいつも存在する．$U_1=U_2$ の場合には明らかに条件 (2) がいつも満たされている．

$U_1=U_2\equiv U_0$ (対称的な井戸) の場合には方程式 (1) は

$$\sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}=\frac{n\pi-ka}{2} \tag{3}$$

となる．変数 $\xi=ka/2$ を導入すると，奇数の n に対しては方程式

$$\cos\xi=\pm\gamma\xi, \qquad \gamma=\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2}{mU_0}} \tag{4}$$

を得る．そして，この方程式の根としては $\tan\xi>0$ となるものをとらなければならない．偶数の n に対しては方程式

$$\sin\xi=\pm\gamma\xi \tag{5}$$

を得る．根としては $\tan\xi<0$ となるものをとらなければならない．これらの二つの方程式の根により，エネルギー準位 $E=2\xi^2\hbar^2/ma^2$ が決定され，その準位の数は（$\gamma\neq0$ の場合）有限である．

とくに $U_0\ll\hbar^2/ma^2$ である深くない井戸では $\gamma\gg1$ となり，方程式（5）はまったく根をもたない．ところが方程式（4）はただ一つの根をもち（右辺が正符号をとる場合）その値はほぼ $\xi\cong\dfrac{1}{\gamma}\left(1-\dfrac{1}{2\gamma^2}\right)$ に等しい．したがって井戸の中にはただ一つのエネルギー準位

$$E_0\cong U_0-\frac{ma^2}{2\hbar^2}U_0^2$$

がある．これは井戸の《上端》近くに位置している．

3.　直方体の《ポテンシャルの箱》の壁面に，中にある粒子が及ぼす圧力を求めよ．

解　x 軸に垂直な壁面に働く力は，粒子のハミルトン関数を x 軸方向の箱の長さで微分したもの $-\partial H/\partial a$ の平均値である．圧力はこの力を壁の面積 bc で割って得られる．式（11.16）により，求める平均値はエネルギー固有値（22.9）を微分して得られる．その結果得られる圧力は

$$p^{(x)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^3bc}n_1^2$$

である．

§ 23.　1次元振動子

1次元の小振動を行なっている粒子（いわゆる**1次元振動子**）を考えよう．このような粒子のポテンシャル・エネルギーはよく知られているように $m\omega^2x^2/2$ である．ここで ω は古典力学における固有振動数である．したがって振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2} \tag{23.1}$$

である．

$x=\pm\infty$ でポテンシャル・エネルギーは無限大となるので，粒子は有界運動しか行なうことができない．このために振動子の全エネルギー・スペクトルは離散的である．

行列の方法により振動子のエネルギー準位を決定しよう[1]．式（19.3）の形をした運動方程式から出発しよう．この場合運動方程式は

$$\ddot{\hat{x}}+\omega^2 x=0 \tag{23.2}$$

である．行列の形ではこの方程式は次のようになる：

$$(\ddot{x})_{mn}+\omega^2 x_{mn}=0.$$

加速度の行列要素は（11.8）に従って $(\ddot{x})_{mn}=i\omega_{mn}(\dot{x})_{mn}=-\omega_{mn}^2 x_{mn}$ となる．したがって次式を得る：

$$(\omega_{mn}^2-\omega^2)x_{mn}=0.$$

これから行列要素 x_{mn} は，$\omega_{mn}=\pm\omega$ に相当するものを除いてすべてゼロとなることがわかる．振動数 $\pm\omega$ が $n\to n\mp1$ の遷移に対応するように，すなわち $\omega_{n,n\mp1}=\pm\omega$ となるように，すべての定常状態に番号をつけよう．するとゼロでない行列要素は $x_{n,n\mp1}$ のみとなる．

波動関数 ψ_n を実に選んだと仮定しよう．x は実の量なので行列要素 x_{mn} もすべて実となる．エルミート性の条件（11.10）から行列 x_{mn} は対称，つまり

$$x_{mn}=x_{nm}$$

である．

座標のゼロでない行列要素を計算するために，次の交換関係を用いよう：

$$\dot{\hat{x}}\hat{x}-\hat{x}\dot{\hat{x}}=-i\frac{\hbar}{m}.$$

これを行列の形に書くと

$$(\dot{x}x)_{mn}-(x\dot{x})_{mn}=-\frac{i\hbar}{m}\delta_{mn}$$

である．行列の積の公式（11.12）を用いて，$m=n$ と置くとこの式は

$$i\sum_l(\omega_{nl}x_{nl}x_{ln}-x_{nl}\omega_{ln}x_{ln})=2i\sum_l\omega_{nl}x_{nl}^2=-i\frac{\hbar}{m}$$

となる．この和の中でゼロでないのは $l=n\pm1$ の項だけなので

$$(x_{n+1,n})^2-(x_{n,n-1})^2=\frac{\hbar}{2m\omega} \tag{23.3}$$

を得る．

1）これはシュレーディンガーによる波動方程式の発見以前にハイゼンベルグ（1925）によってなされた．

この方程式から，$(x_{n+1,n})^2$ なる量は上限はないが下限のある等差数列をなしていると結論される．それはこの中に正の項しか含むことができないからである．いままでわれわれは状態の番号 n の相対的な位置のみを定め，その絶対値は定めていないので，振動子の最初の——基底——状態に対応する n の値を任意に選ぶことができる．それをゼロと置こう．すると $x_{0,-1}$ は恒等的にゼロに等しいと考えるべきである．方程式 (23.3) を $n=0, 1, \cdots$ として逐次適用すると

$$(x_{n,n-1})^2=\frac{n\hbar}{2m\omega}$$

という結果が導かれる．したがって結局，座標のゼロでない行列要素として次式を得る[1)]：

$$x_{n,n-1}=x_{n-1,n}=\sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}. \qquad (23.4)$$

演算子 $\hat{H}$ の行列は対角的であり， 行列要素 H_{nn} は振動子の求めるエネルギー固有値 E_n そのものである．それらを計算するために，次のように書く：

$$\begin{aligned} H_{nn}=E_n&=\frac{m}{2}[(\dot{x}^2)_{nn}+\omega^2(x^2)_{nn}] \\ &=\frac{m}{2}[\sum_l i\omega_{nl}x_{nl}i\omega_{ln}x_{ln}+\omega^2\sum_l x_{nl}x_{ln}] \\ &=\frac{m}{2}\sum_l(\omega^2+\omega_{nl}^2)x_{ln}^2. \end{aligned}$$

l に関する和のうちゼロでないのは $l=n\pm1$ の項だけである．(23.4) を代入すると

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n=0, 1, 2, \cdots \qquad (23.5)$$

を得る．

したがって振動子のエネルギー準位は，等しい間隔 $\hbar\omega$ だけへだたって分布している．基底状態 ($n=0$) のエネルギーは $\hbar\omega/2$ である．それがゼロでないことを強調しておこう．

(23.5) の結果はシュレーディンガー方程式の解からも得られる．振動子に

---

1) われわれは不定な位相 α_n を，(23.4) のすべての行列要素が根号の前に + の符号をとるように選ぶ（38頁の脚注参照）．このような選び方は，相隣る番号をもつ状態間の遷移に対する行列要素だけがゼロでないような行列に対してはいつも可能である．

対するこの方程式は次の形をもつ：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\psi=0. \tag{23.6}$$

ここで座標 x のかわりに，次元のない変数 ξ を次の関係式によって導入すると便利である：

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x. \tag{23.7}$$

すると次の方程式を得る：

$$\psi''+\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-\xi^2\right)\psi=0 \tag{23.8}$$

(ここでダッシュは ξ に関する微分をあらわす).

大きな ξ に対しては $2E/\hbar\omega$ を ξ^2 と比較して無視することができる．方程式 $\psi''=\xi^2\psi$ は漸近的な積分 $\psi=e^{\pm\xi^2/2}$ をもつ（この関数を実際に微分して，ξ に関してより低次の項を無視すると $\psi''=\xi^2\psi$ を得る)．波動関数 ψ は $\xi=\pm\infty$ で有限でなければならないので，指数の中では負の符号を選ばなければならない．したがって方程式 (23.8) の中で

$$\psi=e^{-\frac{\xi^2}{2}}\chi(\xi) \tag{23.9}$$

と置くのが自然である．関数 $\chi(\xi)$ に対しては次の方程式を得る ($2E/\hbar\omega-1=2n$ なる記号を用いる；われわれはすでに $E>0$ ならば $n>-1/2$ であることを知っているからである)：

$$\chi''-2\xi\chi'+2n\chi=0. \tag{23.10}$$

この関数 χ はすべての有限な ξ に対して有限でなければならず，また $\xi=\pm\infty$ で（関数 ψ がゼロとなるためには）ξ の有限なベキよりもはやく無限大に発散してはならない．

方程式 (23.10) にこのような解が存在するのは，数 n の値が（ゼロを含む）正の整数である場合に限る（数学的補遺 § a 参照)．この解はエネルギーとしてすでに知られた固有値 (23.5) を与える．いろいろな整数 n に対応する方程式 (23.10) の解は

$$\chi=\mathrm{const}\cdot H_n(\xi)$$

の形をもつ，ここで $H_n(\xi)$ はエルミート多項式と呼ばれるもので，ξ に関して

n 次の多項式である．これは公式

$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \tag{23.11}$$

によって定義される．関数 ψ_n が規格化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^2(x)dx=1$$

を満足するように const を決めると

$$\psi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \tag{23.12}$$

を得る［(a.7) 参照］．したがって基底状態の波動関数は

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{23.13}$$

となる．この関数は当然のことながら，有限の x に対してはゼロとなることはない．

積分 $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n\psi_m\xi d\xi$ を計算すると座標の行列要素が求められる．計算の結果もちろん（23.4）と同じ値が得られる．

最後にどのようにすれば行列の方法で波動関数 ψ_n を計算できるかを示そう．演算子 $\hat{\dot{x}}\pm i\omega\hat{x}$ の行列のゼロでない要素は

$$(\dot{x}-i\omega x)_{n-1,n}=-(\dot{x}+i\omega x)_{n,n-1}=-i\sqrt{\frac{2\omega\hbar n}{m}} \tag{23.14}$$

だけであることに注目しよう．一般公式（11.11）を用い，$\psi_{-1}\equiv0$ であることを考慮すれば

$$(\hat{\dot{x}}-i\omega x)\psi_0=0$$

と結論される．式 $\hat{\dot{x}}=-i\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{d}{dx}$ を代入することにより，方程式

$$\frac{d\psi_0}{dx}=-\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

を得る．この規格化した解は（23.13）である．さらに

$$(\hat{\dot{x}}+i\omega\hat{x})\psi_{n-1}=(\dot{x}+i\omega x)_{n,n-1}\psi_n=i\sqrt{\frac{2\omega\hbar n}{m}}\psi_n$$

であるため，次の漸化公式を得る：

$$\psi_n=\sqrt{\frac{m}{2\omega\hbar n}}\left(-\frac{\hbar}{m}\frac{d}{dx}+\omega x\right)\psi_{n-1}=\frac{1}{\sqrt{2n}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\psi_{n-1}$$
$$=-\frac{1}{\sqrt{2n}}e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}(e^{-\xi^2/2}\psi_{n-1}).$$

この式を関数 (23.13) に n 回適用すると，規格化された関数 ψ_n をあらわす式 (23.12) を得る．

問　題

1. 振動子について運動量がいろいろな値をとる確率の分布を求めよ．

解 定常状態の波動関数を運動量の固有関数で展開するかわりに，振動子の場合には運動量表示におけるシュレーディンガー方程式から直接出発する方が簡単である．(23.1) に座標の演算子 (15.12) $\hat{x}=i\hbar d/dp$ を代入すると，運動量表示におけるハミルトニアンを得る：

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}-\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dp^2}.$$

したがって運動量表示における波動関数 $a(p)$ に対するシュレーディンガー方程式 $\hat{H}a(p)=Ea(p)$ は

$$\frac{d^2a(p)}{dp^2}+\frac{2}{m\omega^2\hbar^2}\left(E-\frac{p^2}{2m}\right)a(p)=0$$

である．この方程式は (23.6) と全く同じ形をしている；したがってこの解は (23.12) との類推でただちに書き下すことができる．こうして求める確率分布は次の形になる：

$$|a_n(p)|^2\frac{dp}{2\pi\hbar}=\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi m\omega\hbar}}e^{-p^2/m\omega\hbar}H_n^2\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right)dp.$$

2. 不確定関係 (16.7) を用いて振動子の可能なエネルギー値の下限を求めよ．

解 $\overline{x^2}=\bar{x}^2+(\delta x)^2$, $\overline{p^2}=\bar{p}^2+(\delta p)^2$ に気づき，(16.7) を用いると，振動子のエネルギーの平均値に対して，次式が得られる：

$$\bar{E}=\frac{m\omega^2}{2}\overline{x^2}+\frac{\overline{p^2}}{2m}\geq\frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2+\frac{1}{2m}(\delta p)^2\geq\frac{m\omega^2\hbar^2}{8(\delta p)^2}+\frac{(\delta p)^2}{2m}.$$

(δp の関数として) この式の極小値を求めると，エネルギーの平均値，したがって一般に可能なすべてのエネルギー値に対する下限 $E\geq\hbar\omega/2$ が得られる．

3. 不確定関係を最小にする1次元振動子の状態，すなわち波束内の座標と運動量のゆらぎの自乗平均が等式 $\delta p\delta x=\hbar/2$ によって結ばれるような状態の波動関数を求めよ (E. Schrödinger, 1926)[1]．

解 求める波動関数は

1) この状態は干渉性（コヒーレント）と呼ばれる．

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi)^{1/4}(\delta x)^{1/2}}\exp\left\{\frac{i\bar{p}x}{\hbar}-\frac{(x-\bar{x})^2}{4(\delta x)^2}-i\varphi(t)\right\} \tag{1}$$

の形をしていなければならない．与えられた各時刻におけるこの式の座標への依存性は式 (16.8) と一致している．ただし $\bar{x}=\bar{x}(t)$ および $\bar{p}=\bar{p}(t)=m\dot{\bar{x}}(t)$ は座標および運動量の平均値である．(19.3) 式により1次元振動子 ($U=m\omega^2x^2/2$) に対しては，$\dot{\hat{p}}=-m\omega^2x$ が得られ，したがって平均値に対しては $\dot{\bar{p}}=-m\omega^2\bar{x}$ あるいは

$$\ddot{\bar{x}}+\omega^2\bar{x}=0 \tag{2}$$

となる．つまり関数 $\bar{x}(t)$ は古典的な運動方程式を満足する．(1) 式における定係数は規格化条件 $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2dx=1$ によって決定される．この因子の他に，Ψ は時間に依存する位相 $\varphi(t)$ をもつ位相因子をも含んでいる．未知定数 δx および関数 $\varphi(t)$ は (1) を波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

に代入して決められる．(2) を考慮すると，代入の結果

$$\left(\frac{x^2}{2}-x\bar{x}\right)\left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}-\frac{1}{4(\delta x)^4}\right)+\left[\frac{m^2\dot{\bar{x}}^2}{2\hbar^2}-\frac{\bar{x}^2}{8(\delta x)^4}+\frac{1}{4(\delta x)^2}-\frac{m}{\hbar}\dot{\varphi}(t)\right]=0$$

を得る．これから $(\delta x)^2=\hbar/2m\omega$ であり，それゆえ

$$\dot{\varphi}=\frac{m}{2\hbar}(\dot{\bar{x}}^2-\omega^2\bar{x}^2)+\frac{\omega}{2},\qquad \varphi=\frac{1}{2\hbar}\bar{p}\bar{x}+\frac{\omega}{2}t$$

となる．こうして最後に

$$\Psi(x,t)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left\{\frac{i\bar{p}x}{\hbar}-\frac{m\omega(x-\bar{x})^2}{2\hbar}\right\}\exp\left\{-\frac{i\omega t}{2}-i\frac{\bar{p}\bar{x}}{2\hbar}\right\} \tag{3}$$

を得る．$\bar{x}=0$, $\bar{p}=0$ のとき，この関数は振動子の基底状態の波動関数である $\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}$ に移行する．

干渉性の状態における振動子の平均エネルギーは

$$\bar{E}=\frac{\overline{p^2}}{2m}+\frac{m\omega^2\overline{x^2}}{2}=\frac{\bar{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\bar{x}^2}{2}+\frac{\hbar\omega}{2}\equiv\hbar\omega\left(\bar{n}+\frac{1}{2}\right) \tag{4}$$

である．ここで導入された量 $\bar{n}$ は，与えられた状態における $\hbar\omega$ の平均《量子数》である．ここでわかるように，干渉性状態は古典的方程式 (2) を満足するある関数 $\bar{x}(t)$ によって完全に決定される．このような関数の一般的な形は

$$\frac{m\omega\bar{x}+i\bar{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}=ae^{-i\omega t},\qquad |a|^2=\bar{n} \tag{5}$$

のように書くことができる．

関数 (3) は振動子の定常状態の波動関数で展開することができて

$$\Psi=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\Psi_n,\qquad \Psi_n(x,t)=\psi_n(x)\exp\left\{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t\right\}.$$

この展開式の係数は[1]

---

1)　§41 の問題1における計算と比較せよ．

$$a_n=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_n^*\Psi\,dx. \tag{6}$$

これから n 番目の状態に振動子を見いだす確率は

$$w_n=|a_n|^2=e^{-\bar{n}}\frac{\bar{n}^n}{n!} \tag{7}$$

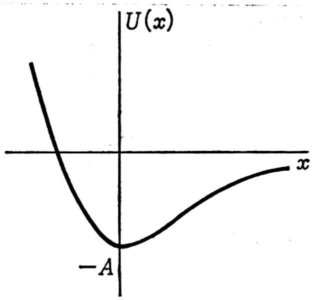
であり，これはよく知られたポアッソン分布である．

4.　ポテンシャル・エネルギー

$$U(x)=A(e^{-2\alpha x}-2e^{-\alpha x})$$

の場の中を運動する粒子のエネルギー準位を求めよ（第 3 図，P. M. Morse）．

解　エネルギーの正の固有値のスペクトルは連続である（しかも準位は縮退していない）．しかし負の値のスペクトルは離散的である．



第 3 図

シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-Ae^{-2\alpha x}+2Ae^{-\alpha x})\psi=0$$

となる．（0 から $+\infty$ までの値をとる）新しい変数

$$\xi=\frac{2\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar}e^{-\alpha x}$$

および記号

$$s=\frac{\sqrt{-2mE}}{\alpha\hbar},\qquad n=\frac{\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar}-\left(s+\frac{1}{2}\right) \tag{1}$$

を導入しよう（離散スペクトルを考察する．したがって $E<0$ である）．するとシュレーディンガー方程式は次の形をとる：

$$\psi''+\frac{1}{\xi}\psi'+\left(-\frac{1}{4}+\frac{n+s+1/2}{\xi}-\frac{s^2}{\xi^2}\right)\psi=0.$$

関数 ψ は $\xi\to\infty$ で漸近的に $e^{\pm\xi/2}$ のように振舞い，$\xi\to 0$ では $\xi^{\pm s}$ に比例している．有限性を考えれば $\xi\to\infty$ では $e^{-\xi/2}$ のように振舞い，$\xi\to 0$ では ξ^s のように振舞う解を選ばなければならない．そこで次のように置く：

$$\psi=e^{-\xi/2}\xi^s w(\xi).$$

すると w に対する次の方程式を得る：

$$\xi w''+(2s+1-\xi)w'+nw=0. \tag{2}$$

これは次の条件の下で解かれなければならない：w は $\xi=0$ で有限，また $\xi\to\infty$ で ξ の有限なベキよりはやく無限大に発散することはない．方程式 (2) は合流型超幾何関数

$$w=F(-n,2s+1,\xi)$$

の満たす方程式である（数学的補遺 § d 参照）．要求された条件を満足する解は，n が負でない整数のときに得られる（このとき関数 F は多項式となる）．そして定義の式 (1) によりエネルギー準位として次の値を得る：

$$-E_n=A\left[1-\frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2mA}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2.$$

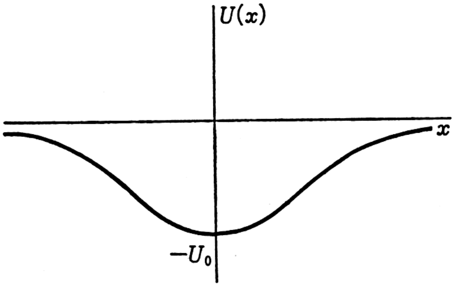
ここでnは正の整数で，ゼロから始まり

$$\frac{\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar}>n+\frac{1}{2}$$

を満足する最大値までの値をとる（したがってパラメーターsは正となり，その定義と合っている）．したがって離散スペクトルは有限個の準位を含む．もしも

$$\frac{\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar}<\frac{1}{2}$$

であれば離散スペクトルは一般に存在しない．



第 4 図

5.　同じく $U=-\dfrac{U_0}{\cosh^2\alpha x}$（第4図）の場合を解け．

解　正のエネルギー・スペクトルは連続的であるが，負のエネルギー・スペクトルは離散的である．後者を研究しよう．シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{U_0}{\cosh^2\alpha x}\right)\psi=0$$

である．変数変換$\xi=\tanh\alpha x$を行ない

$$\varepsilon=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar\alpha},\quad \frac{2mU_0}{\alpha^2\hbar^2}=s(s+1),\quad s=\frac{1}{2}\left(-1+\sqrt{1+\frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right)$$

なる記号を導入すると次式を得る：

$$\frac{d}{d\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{d\psi}{d\xi}\right]+\left[s(s+1)-\frac{\varepsilon^2}{1-\xi^2}\right]\psi=0.$$

これはルジャンドル陪関数の満たす方程式である．これに置換

$$\psi=(1-\xi^2)^{\varepsilon/2}w(\xi)$$

と補助的な変数変換$\frac{1}{2}(1-\xi)=u$を行なうと，次のような超幾何方程式の形にすることができる：

$$u(1-u)w''+(\varepsilon+1)(1-2u)w'-(\varepsilon-s)(\varepsilon+s+1)w=0.$$

$\xi=1$で（すなわち$x=\infty$で）有限な解は

$$\psi=(1-\xi^2)^{\varepsilon/2}F[\varepsilon-s,\varepsilon+s+1,\varepsilon+1,(1-\xi)/2]$$

である．また$\xi=-1$で（すなわち$x=-\infty$で）ψが有限であるためには，$\varepsilon-s=-n$でなければならない．ここで$n=0,1,2,\cdots$（そのときFはn次の多項式となり，$\xi=-1$で有限である）．

こうしてエネルギー準位は条件$s-\varepsilon=n$によって決定され，これから

$$E_n=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{8m}\left[-(1+2n)+\sqrt{1+\frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]^2$$

となる．条件$\varepsilon>0$，すなわち$n<s$によって決まる有限個の準位がある．

§ 24. 一様な場の中の運動

一様な外場の中の粒子の運動を研究しよう．場の方向をx軸に選び，場の中の粒子に働く力をFとしよう．eを粒子の電荷とすると，強さEの電場の中でこの力は$F=eE$に等しい．

一様な場の中の粒子のポテンシャル・エネルギーは$U=-Fx+\text{const}$という形をしている．$x=0$で$U=0$になるように定数を選ぶと$U=-Fx$となる．この問題のシュレーディンガー方程式は次の形になる：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E+Fx)\psi=0. \tag{24.1}$$

$x\to-\infty$でUは$+\infty$になり，$x\to+\infty$で$U\to-\infty$となるので，エネルギー準位は連続スペクトルをつくって$-\infty$から$+\infty$までの全範囲の値を占めることは明らかである．これらの固有値はすべて縮退がなく，$x=-\infty$の側では有限，$x\to+\infty$の方向では無限運動に対応している．

座標のかわりに次元のない変数

$$\xi=\left(x+\frac{E}{F}\right)\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3} \tag{24.2}$$

を導入しよう．すると方程式（24.1）は次の形になる：

$$\psi''+\xi\psi=0. \tag{24.3}$$

この方程式はエネルギー・パラメーターを全く含んでいない．それゆえ有限性の必要条件を満足するその解が求められれば，任意のエネルギー値に対する固有関数が得られたことになる．

方程式（24.3）のすべてのxで有限な解は次の形をもつ（数学的補遺§b 参照）：

$$\psi(\xi)=A\Phi(-\xi). \tag{24.4}$$

ここで

$$\Phi(\xi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\cos\left(\frac{u^3}{3}+u\xi\right)du$$

はエアリ関数と呼ばれる関数，Aはあとで決める規格化因子である．

$\xi\to-\infty$のとき関数$\psi(\xi)$は指数関数的にゼロに収束する．絶対値で大きいξ

の負の値のところの $\psi(\xi)$ を定義する漸近形は次の形をもつ［(b. 4) 参照］：

$$\psi(\xi)\approx\frac{A}{2|\xi|^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}}. \tag{24.5}$$

ξ が大きい正の値のところの関数 $\psi(\xi)$ の漸近形は次のようになる［(b. 5) 参照］[1)]：

$$\psi(\xi)=\frac{A}{\xi^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}+\frac{\pi}{4}\right). \tag{24.6}$$

連続スペクトルの固有関数を規格化する一般的な規則 (5. 4) に従って，関数 (24. 4) をエネルギーの δ-関数で規格化した形に直すことにする：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(\xi)\psi(\xi')dx=\delta(E'-E). \tag{24.7}$$

§21 では波動関数の漸近表式を用いて規格化係数を決定する簡単な方法を示しておいた．この方法に従って関数 (24. 6) を二つの進行波の和の形にあらわそう：

$$\psi(\xi)\approx\frac{A}{2\xi^{1/4}}\left\{\exp\left[i\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\right]+\exp\left[-i\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\right]\right\}$$

これらの二つの項の各々に対して計算される流れの密度は，

$$v\left(\frac{A}{2\xi^{1/4}}\right)^2=\sqrt{\frac{2}{m}(E+Fx)}\left(\frac{A}{2\xi^{1/4}}\right)^2=A^2\frac{(2\hbar F)^{1/3}}{4m^{2/3}}.$$

これを $1/2\pi\hbar$ に等しく置いて次式を得る：

$$A=\frac{(2m)^{1/3}}{\pi^{1/2}F^{1/6}\hbar^{2/3}}. \tag{24.8}$$

問　題

一様な場の中の粒子に対する運動量表示の波動関数を求めよ．

解　運動量表示におけるハミルトニアンは

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}-i\hbar F\frac{d}{dp}$$

である．したがって波動関数 $a(p)$ に対するシュレーディンガー方程式は次の形をしている：

$$-i\hbar F\frac{da}{dp}+\left(\frac{p^2}{2m}-E\right)a=0.$$

---

1)　漸近形 (24. 5) と (24. 6) は，古典的に到達できない領域と，できる領域内の波動関数の準古典的な表式にちょうど対応していることをすこし早目に指摘しておこう (§ 47).

この方程式を解くと，求める関数

$$a_E(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar F}\left(Ep-\frac{p^3}{6m}\right)\right\}$$

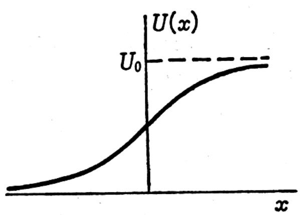
を得る．これらの関数は条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}a_E^*(p)a_{E'}(p)dp=\delta(E'-E)$$

によって規格化されている．

§ 25. 透過係数

第5図に示した形の場の中の粒子の運動を研究しよう：$U(x)$ はある定数の極限値（$x\to-\infty$ で $U=0$）から単調に増大し，他の定数の極限値（$x\to+\infty$ で $U=U_0$）に達する．古典力学に従えば，$E<U_0$ なるエネルギーをもち場の中を左から右へ運動している粒子は，**ポテンシャルの壁**に達すると，壁で反射されて逆の方向へ動き始める；ところがもしも $E>U_0$ であれば，粒子は速度の減少したままはじめと同じ方向に動きつづける．量子力学では次のような新しい現象が起こる．$E>U_0$ であっても粒子はポテンシャルの壁で反射されることがある．反射の確率は原理的に次のようにして計算される．



第 5 図

粒子は左から右へ運動しているとしよう．x が大きい正の値のところでは，波動関数は《壁の上》を越えて x 軸の正の方向に運動している粒子をあらわしている．すなわち波動関数は次の漸近形をもつ：

$$x\to\infty \text{ で } \quad \psi\approx Ae^{ik_2x},$$

$$k_2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U_0)} \tag{25.1}$$

（A は定数）．この境界条件を満足するシュレーディンガー方程式の解を求めて，それの $x\to-\infty$ における漸近式を計算しよう；それは自由運動の方程式の二つの解の線形結合で次の形になる：

$$x\to-\infty \text{ で } \quad \psi\approx e^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}, \quad k_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}. \tag{25.2}$$

最初の項は壁に入射する粒子に対応している（この項の係数が1となるよう

にψは規格化されているものとする)．第2項は壁で反射される粒子をあらわしている．入射波の流れの密度はk_1に比例し，また反射波では$k_1|B|^2$に，透過波では$k_2|A|^2$に比例する．粒子の**透過係数**Dを，透過波と入射波の流れの密度の比として定義しよう：

$$D=\frac{k_2}{k_1}|A|^2. \tag{25.3}$$

同様にして**反射係数**Rを，反射波と入射波の流れの密度の比として定義することができる；明らかに$R=1-D$であるので：

$$R=|B|^2=1-\frac{k_2}{k_1}|A|^2 \tag{25.4}$$

(AとBの間のこの関係は自動的に満たされている)．

もしも粒子が$E<U_0$なるエネルギーをもって左から右へ運動していると，k_2は純虚数となり，波動関数は$x\to+\infty$で指数関数的に減衰する．反射波の流れは入射波の流れに等しい．つまりポテンシャルの壁で粒子の全反射が起こっている．しかしこの場合でも$E<U$なる範囲に粒子を見いだす確率はxの増加とともに急速に減少するが，まったくのゼロではないことを強調しておこう．

($E>U_0$なるエネルギーをもつ）一般的な任意の定常状態の場合には，$x\to-\infty$ならびに$x\to+\infty$における波動関数の漸近形は，x軸の二つの方向に伝播する二つの波の和であらわされる：

$$\begin{aligned} &x\to-\infty\ \text{で} \quad \psi=A_1e^{ik_1x}+B_1e^{-ik_1x},\\ &x\to+\infty\ \text{で} \quad \psi=A_2e^{ik_2x}+B_2e^{-ik_2x}. \end{aligned} \tag{25.5}$$

この式はどちらも線形微分方程式の同一の解の漸近形をあらわしているので，係数A_1, B_1およびA_2, B_2の間には線形関係が存在する．いま$A_2=\alpha A_1+\beta B_1$と置こう．ここでα, βは（一般には複素数の）定数で，場$U(x)$の具体的な形に依存している．B_2に対しても同様の関係を書き下すことができるが，それはシュレーディンガー方程式が実であるという考えに基づいている．この考えによれば，もしもψが与えられたシュレーディンガー方程式の解であれば，複素共役の関数ψ^*もまた同じ方程式の解である．漸近形

$$\begin{aligned} &x\to-\infty\ \text{で} \quad \psi^*=A_1^*e^{-ik_1x}+B_1^*e^{ik_1x},\\ &x\to+\infty\ \text{で} \quad \psi^*=A_2^*e^{-ik_2x}+B_2^*e^{ik_2x} \end{aligned}$$

は(25.5)と比べて定数係数の*印だけが異なっている；それゆえ$B_2^*=\alpha B_1^*+$

βA_1^* あるいは $B_2=\alpha^* B_1+\beta^* A_1$ を得る．したがって（25.5）の中の係数は互いに次の関係で結ばれている：

$$A_2=\alpha A_1+\beta B_1, \qquad B_2=\beta^* A_1+\alpha^* B_1. \tag{25.6}$$

x 軸に沿った流れが一定であるという条件から，(25.5) の中の係数に対して

$$k_1(|A_1|^2-|B_1|^2)=k_2(|A_2|^2-|B_2|^2)$$

なる関係が得らる．ここで（25.6）に従って A_2, B_2 を A_1, B_1 であらわすと

$$|\alpha|^2-|\beta|^2=\frac{k_1}{k_2} \tag{25.7}$$

を得る．

とくに関係式（25.6）を用いれば，（エネルギーが $E>U_0$ と与えられているときに）x 軸の正の方向に運動する粒子と負の方向に運動する粒子の反射係数が同じであることを示すことができる．実際に，関数（25.5）において $B_2=0$ と置けば前者の場合が得られる．ここで $B_1/A_1=-\beta^*/\alpha^*$ である．また $A_1=0$ と置けば後者の場合が得られる．ここで $A_2/B_2=\beta/\alpha^*$ である．それぞれに対応する反射係数は

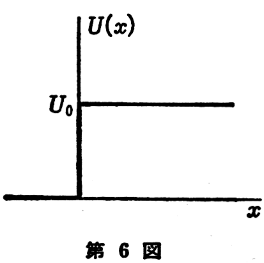
$$R_1=\left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2=\left|\frac{\beta^*}{\alpha^*}\right|^2, \qquad R_2=\left|\frac{A_2}{B_2}\right|^2=\left|\frac{\beta}{\alpha^*}\right|^2$$

となり，これから $R_1=R_2$ であることは明らかである．

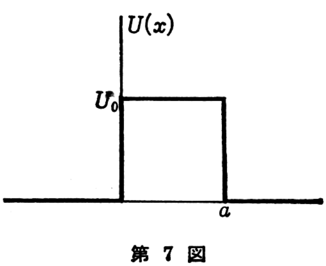
問　　題

1. 垂直なポテンシャルの壁（第6図）による粒子の反射係数を求めよ．粒子のエネルギーは $E>U_0$ とする．

解　$x>0$ の全領域で波動関数は（25.1）の形をとり，$x<0$ の領域では（25.2）の形をとる．定数 A および B は $x=0$ における ψ と $d\psi/dx$ の連続条件から求められる：



第 6 図



第 7 図

$$1+B=A, \qquad k_1(1-B)=k_2A.$$

これから

$$A=\frac{2k_1}{k_1+k_2}, \qquad B=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}.$$

反射係数 (25.4) は

$$R=\left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2=\left(\frac{p_1-p_2}{p_1+p_2}\right)^2$$

となる[1]. $E=U_0$ ($k_2=0$) で R は1となる. また $E\to\infty$ では $R=(U_0/4E)^2$ のようにゼロに収束する.

2. 垂直なポテンシャル障壁 (第7図) を通る粒子の透過係数を求めよ.

解　$E>U_0$ とし, 入射粒子は左から右へ運動しているとしよう. すると各領域における波動関数として次式を得る:

$$x<0 \text{ では} \qquad \psi=e^{ik_1x}+Ae^{-ik_1x},$$
$$0<x<a \text{ では} \qquad \psi=Be^{ik_2x}+B'e^{-ik_2x},$$
$$x>a \text{ では} \qquad \psi=Ce^{ik_1x}.$$

($x>a$ の側には, x 軸の正の方向に伝播する透過波のみが存在するはずである). 定数 A, B, B', C は点 $x=0, a$ における ψ と $d\psi/dx$ の連続条件から求められる. 透過係数は $D=k_1|C|^2/k_1=|C|^2$ と求められる. 計算の結果次式を得る:

$$D=\frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2 ak_2+4k_1^2k_2^2}.$$

$E<U_0$ のときは k_2 は純虚数となる; それに対応する D の表式は k_2 を $i\kappa_2$ と置きかえて得られる. ここで $\hbar\kappa_2=\sqrt{2m(U_0-E)}$ である. すなわち

$$D=\frac{4k_1^2\kappa_2^2}{(k_1^2+\kappa_2^2)^2\sinh^2 a\kappa_2+4k_1^2\kappa_2^2}.$$

3. 次式で与えられるポテンシャルの壁 (第5図) による粒子の反射係数を求めよ:

$$U(x)=U_0/(1+e^{-\alpha x}).$$

粒子のエネルギーは $E>U_0$ とする.

解　シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}\right)\psi=0$$

となる. われわれは $x\to+\infty$ で

$$\psi=\text{const}\cdot e^{ik_2x}$$

なる形をもつ解を見いださなければならない. 新しい変数

---

1) 古典力学の極限の場合には反射係数はゼロとなるはずである. ところがここで得られた式は量子定数を全然含んでいない. この見かけ上の矛盾は次のように説明される. 古典的な極限が対応するのは, 粒子のド・ブロイ波長 $\lambda\sim\hbar/p$ が, 問題の特徴的な大きさ, つまり場 $U(x)$ が顕著に変化する距離にくらべて小さい場合である. いま考えている特殊な例では, この距離は ($x=0$ の点で) ゼロに等しく, したがって極限への移行を行なうことができない.

$$\xi=-e^{-\alpha x}$$

を導入する（この変数は $-\infty$ から 0 までの値をとる）．そして

$$\psi=\xi^{-ik_2/\alpha}w(\xi)$$

なる形の解を求めよう．ここで $w(\xi)$ は $\xi\to 0$（すなわち $x\to\infty$ で）定数に収束する．$w(\xi)$ に対しては次の超幾何型の方程式を得る：

$$\xi(1-\xi)w''+\left(1-\frac{2i}{\alpha}k_2\right)(1-\xi)w'+\frac{1}{\alpha^2}(k_2^2-k_1^2)w=0.$$

これは超幾何関数

$$w=F\left[\frac{i}{\alpha}(k_1-k_2),\quad -\frac{i}{\alpha}(k_1+k_2),\quad -\frac{2i}{\alpha}k_2+1,\quad \xi\right]$$

の解をもつ（定数因子は省いた）．$\xi\to 0$ でこの関数は 1 に収束する．すなわち最初に課した条件を満足している．

$\xi\to-\infty$（すなわち $x\to-\infty$）における関数 ψ の漸近形は

$$\psi\approx\xi^{-ik_2/\alpha}[C_1(-\xi)^{i(k_2-k_1)/\alpha}+C_2(-\xi)^{i(k_1+k_2)/\alpha}]$$
$$=(-1)^{-ik_2/\alpha}[C_1e^{ik_1x}+C_2e^{-ik_1x}]$$

である[1]．ここで

$$C_1=\frac{\Gamma\left(-\frac{2i}{\alpha}k_1\right)\Gamma\left(-\frac{2i}{\alpha}k_2+1\right)}{\Gamma\left(-\frac{i}{\alpha}(k_1+k_2)\right)\Gamma\left(-\frac{i}{\alpha}(k_1+k_2)+1\right)},$$

$$C_2=\frac{\Gamma\left(\frac{2i}{\alpha}k_1\right)\Gamma\left(-\frac{2i}{\alpha}k_2+1\right)}{\Gamma\left(\frac{i}{\alpha}(k_1-k_2)\right)\Gamma\left(\frac{i}{\alpha}(k_1-k_2)+1\right)}.$$

求める反射係数は $R=|C_2/C_1|^2$ である；よく知られた公式

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x)=\frac{\pi}{\sin\pi x}$$

を用いて計算すると

$$R=\left(\frac{\sinh\frac{\pi}{\alpha}(k_1-k_2)}{\sinh\frac{\pi}{\alpha}(k_1+k_2)}\right)^2$$

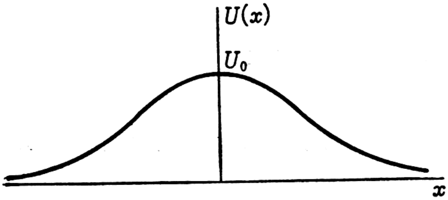
なる結果を得る．$E=U_0$ ($k_2=0$) のときは R は 1 となり，$E\to\infty$ では式

$$R=\left(\frac{\pi U_0}{\alpha\hbar}\right)^2\frac{2m}{E}e^{-\frac{4\pi}{\alpha\hbar}\sqrt{2mE}}$$

に従ってゼロに収束する．古典力学へ極限移行を行なえば，当然ながら R はゼロになる．

4. 式

1) 公式 (e.6) を参照せよ．この式の右辺の二つの各項の中で，われわれは展開の第 1 項をとるべきである．すなわち $1/z$ を引数とする超幾何関数を 1 と置くべきである．



第 8 図

$$U(x)=\frac{U_0}{\cosh^2 \alpha x}$$

（第8図）で与えられるポテンシャル障壁を通過する粒子の透過係数を求めよ；粒子のエネルギーは $E<U_0$ とする．

解　この問題に対するシュレーディンガー方程式は，§23の問題5で考察したものから U_0 の符号をかえることによって得られる．またエネルギー E は今度は正と考える．

前問と同じ方法によって次の解を得る：

$$\psi=(1-\xi^2)^{-\frac{ik}{2\alpha}}F\left(-\frac{ik}{\alpha}-s,\ -\frac{ik}{\alpha}+s+1,\ -\frac{ik}{\alpha}+1,\ \frac{1-\xi}{2}\right). \tag{1}$$

ここで

$$\xi=\tanh \alpha x,\quad k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE},\quad s=\frac{1}{2}\left(-1+\sqrt{1-\frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right)$$

である．

この解は，$x\to\infty$（すなわち $\xi\to1$，$(1-\xi)\approx2e^{-2x}$）で波動関数が進行波（$\sim e^{ikx}$）だけを含むという条件を満足している．$x\to-\infty$（$\xi\to-1$）における波動関数の漸近形は，公式（e.7）から超幾何関数を書きかえて得られる：

$$\psi\sim e^{-ikx}\frac{\Gamma(ik/\alpha)\Gamma(1-ik/\alpha)}{\Gamma(-s)\Gamma(1+s)}+e^{ikx}\frac{\Gamma(-ik/\alpha)\Gamma(1-ik/\alpha)}{\Gamma(-ik/\alpha-s)\Gamma(-ik/\alpha+s+1)}. \tag{2}$$

この関数の中の係数の比の絶対値の自乗を計算すれば，透過係数 $D=1-R$ に対するつぎのような表式を得る：

$$\frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}<1 \text{ では}\qquad D=\frac{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}}{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}+\cos^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{1-\dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}}\right)},$$

$$\frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}>1 \text{ では}\qquad D=\frac{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}}{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}+\cosh^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{\dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}-1}\right)}.$$

これらの第一の式は，$U_0<0$ の場合つまり粒子がポテンシャルの山ではなくポテンシャルの井戸を通過する場合にもあてはまる．この場合もしも $1+(8m|U_0|/\hbar^2\alpha^2)=(2n+1)^2$ であると $D=1$ となるのは興味深い．つまり井戸の深さ $|U_0|$ がある定まった値になると，そこを通過する粒子は反射されない．このことは式（2）からもわかることである．すなわち s が正の整数のときには e^{-ikx} の項はその中に一般には存在しない．

第4章　角運動量

§26. 角運動量

われわれが§15で運動量の保存則を導いたときには，空間の一様性という性質を閉じた粒子系に対して適用した．空間は一様性とならんで等方性——空間のあらゆる方向は同等——という性質ももっている．それゆえ，閉じた系のハミルトニアンは系全体を任意の軸のまわりに任意の角度だけ回転しても不変でなければならない．任意の無限小回転に対してこの条件が満たされることを要求すれば十分である．

$\delta\boldsymbol{\varphi}$ を無限小回転のベクトルとして，その大きさは回転角 $\delta\varphi$ に等しく回転軸の方向を向いているとしよう．このような回転による（粒子の動径ベクトル $\boldsymbol{r}_a$ の）変化 $\delta\boldsymbol{r}_a$ は，

$$\delta\boldsymbol{r}_a=[\delta\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{r}_a]$$

に等しい*⁾．任意の関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)$ は，この変換によって次の関数に移る：

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}_1+\delta\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2+\delta\boldsymbol{r}_2, \cdots)&=\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)+\sum_a \delta\boldsymbol{r}_a\nabla_a\psi\\&=\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots)+\sum_a [\delta\boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{r}_a]\nabla_a\psi\\&=(1+\delta\boldsymbol{\varphi}\sum_a [\boldsymbol{r}_a\nabla_a])\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots).\end{aligned}$$

表式

$$1+\delta\boldsymbol{\varphi}\sum_a [\boldsymbol{r}_a\nabla_a]$$

は無限小回転の演算子である．無限小回転が系のハミルトニアンを変化させないという事実は，回転演算子と $\hat{H}$ 演算子の可換性によって表現される（§15参照）．$\delta\boldsymbol{\varphi}$ は定ベクトルであるから，この条件は次の関係にまとめられる：

$$(\sum_a [\boldsymbol{r}_a\nabla_a])\hat{H}-\hat{H}(\sum_a [\boldsymbol{r}_a\nabla_a])=0. \qquad (26.1)$$

---

*⁾ 本巻では，二つのベクトルを角括弧で囲んで，ベクトル積をあらわしている（訳注）．

これはある保存則をあらわしている.

閉じた系について空間の等方性からその保存性が導かれる量は系の**角運動量**である(第I巻『力学』§9参照). したがって, 演算子 $\sum[\boldsymbol{r}_a\nabla_a]$ は定係数を除いて系の運動の全角運動量に, また和の各項 $[\boldsymbol{r}_a\nabla_a]$ は個別粒子の角運動量に対応しなければならない.

比例定数は $-i\hbar$ に等しいと置かなければならない; こうすれば粒子の角運動量演算子 $-i\hbar[\boldsymbol{r}\nabla]=[\boldsymbol{r}\hat{\boldsymbol{p}}]$ の表式が, 通常の古典的表式 $[\boldsymbol{r}\boldsymbol{p}]$ に正確に対応する. 以下では, いつも $\hbar$ を単位にしてはかった角運動量を用いる. このように定義した個別粒子の角運動量演算子を $\hat{\boldsymbol{l}}$ であらわし, 系全体の角運動量を $\hat{\boldsymbol{L}}$ であらわすことにしよう. したがって, 粒子の角運動量の演算子は

$$\hbar\hat{\boldsymbol{l}}=[\boldsymbol{r}\hat{\boldsymbol{p}}]=-i\hbar[\boldsymbol{r}\nabla], \tag{26.2}$$

あるいは成分で書いて

$$\hbar\hat{l}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y,\quad \hbar\hat{l}_y=z\hat{p}_x-x\hat{p}_z,\quad \hbar\hat{l}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x$$

となる.

外場の中に置かれた系では, 角運動量は一般に保存しない. しかし場がある特定の対称性をもつときには, 角運動量の保存はいぜんとして成り立っている. たとえばもしも系が中心対称の場の中に置かれていれば, 中心から見た空間のすべての方向は同等であり, それゆえこの中心の回りの角運動量は保存するであろう. 同じように軸対称の場の中では, 対称軸方向の角運動量成分は保存する. 古典力学において成り立つこれらの保存則は, すべて量子力学においても成り立っている.

定常状態で角運動量の保存しない系では, 角運動量は確定値をとらない. このような場合にも, この定常状態における角運動量の平均値に興味がもたれることがある. 容易にわかるように, 縮退のない定常状態では角運動量の平均値はいつもゼロに等しい. それを示そう. 時間の符号を変えてもエネルギーは不変である. またこのエネルギー準位にはたった一つの定常状態が対応しているので, t を $-t$ と書きかえても系の状態は当然不変でなければならない. これはすべての量, たとえば角運動量の平均値が不変でなければならないことを意味している. ところが時間の符号を変えると角運動量の符号は変化し $\bar{\boldsymbol{L}}=-\bar{\boldsymbol{L}}$ となるはずである. これから $\bar{\boldsymbol{L}}=0$ が導かれる. $\psi^*\hat{\boldsymbol{L}}\psi$ の積分としての平均値

$\bar{\boldsymbol{L}}$ の数学的定義から出発しても同じ結果を得ることができる．すなわち縮退のない状態の波動関数は実数である（§18 の最後参照）．それゆえ，表式

$$\bar{\boldsymbol{L}}=-i\hbar\int\psi\left(\sum_a[\boldsymbol{r}_a\nabla_a]\right)\psi dq$$

は純虚数である．ところが $\bar{\boldsymbol{L}}$ はもちろん実の量でなければならないから，明らかに $\bar{\boldsymbol{L}}=0$ となる．

角運動量演算子と座標または運動量演算子との交換則を求めよう．関係式 (16.2) を用いれば容易に

$$\begin{aligned}&\{\hat{l}_x, x\}=0, &&\{\hat{l}_x, y\}=iz, &&\{\hat{l}_x, z\}=-iy,\\ &\{\hat{l}_y, y\}=0, &&\{\hat{l}_y, z\}=ix, &&\{\hat{l}_y, x\}=-iz,\\ &\{\hat{l}_z, z\}=0, &&\{\hat{l}_z, x\}=iy, &&\{\hat{l}_z, y\}=-ix,\end{aligned} \tag{26.3}$$

が導かれる．たとえば次のようになる：

$$l_xy-y\hat{l}_x=\frac{1}{\hbar}(y\hat{p}_z-z\hat{p}_y)y-y(y\hat{p}_z-z\hat{p}_y)\frac{1}{\hbar}=-\frac{z}{\hbar}\{\hat{p}_y, y\}=iz.$$

(26.3) の全関係は次のテンソル形に書くことができる：

$$\{\hat{l}_i, x_k\}=ie_{ikl}x_l. \tag{26.4}$$

ここで e_{ikl} は 3 階の反対称単位テンソルである[1]．また二度くり返される《重複》添字については和をとるものとする．

容易に確かめられるように，角運動量と運動量のあいだにも同様の交換関係が成り立つ：

$$\{\hat{l}_i, \hat{p}_k\}=ie_{ikl}\hat{p}_l. \tag{26.5}$$

これらの公式を用いれば，角運動量成分の演算子のあいだの交換則は容易に求められる．たとえば次の式を得る：

---

1)　3 階の反対称単位テンソル e_{ikl}（単位軸性テンソルとも呼ばれる）は $e_{123}=1$ で，しかも三つの添字について反対称なテンソルとして定義される．明らかにその27個の成分のうちでゼロでないのは，添字 i, k, l が数 1, 2, 3 の置換であるような 6 個の成分だけである．このとき順列 i, k, l が数字 1, 2, 3 の対置換（互換）を偶数回行なって得られるならばこの成分は +1 に等しく，互換を奇数回行なって得られるならば −1 に等しい．明らかに

$$e_{ikl}e_{ikm}=2\delta_{lm}, \qquad e_{ikl}e_{ikl}=6$$

である．

二つのベクトル $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ のベクトル積であるベクトル $\boldsymbol{C}=[\boldsymbol{AB}]$ の成分は，テンソル e_{ikl} を用いて次の形に書くことができる：

$$C_i=e_{ikl}A_kB_l.$$

$$\hbar(\hat{l}_x\hat{l}_y-\hat{l}_y\hat{l}_x)=\hat{l}_x(z\hat{p}_x-x\hat{p}_z)-(z\hat{p}_x-x\hat{p}_z)\hat{l}_x$$
$$=(\hat{l}_xz-z\hat{l}_x)\hat{p}_x-x(\hat{l}_x\hat{p}_z-\hat{p}_z\hat{l}_x)$$
$$=-iy\hat{p}_x+ix\hat{p}_y=i\hbar\hat{l}_z.$$

このようにして

$$\{\hat{l}_y,\hat{l}_z\}=i\hat{l}_x,\qquad \{\hat{l}_z,\hat{l}_x\}=i\hat{l}_y,\qquad \{\hat{l}_x,\hat{l}_y\}=i\hat{l}_z \tag{26.6}$$

あるいは

$$\{\hat{l}_i,\hat{l}_k\}=ie_{ikl}\hat{l}_l \tag{26.7}$$

が得られる．同様の関係が系の全角運動量演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ のあいだにも成り立つ．実際，別の粒子の角運動量演算子は互いに交換するから，たとえば：

$$\sum_a\hat{l}_{ay}\sum_a\hat{l}_{az}-\sum_a\hat{l}_{az}\sum_a\hat{l}_{ay}=\sum_a(\hat{l}_{ay}\hat{l}_{az}-\hat{l}_{az}\hat{l}_{ay})=i\sum_a\hat{l}_{ax}.$$

したがって

$$\{\hat{L}_y,\hat{L}_z\}=i\hat{L}_x,\qquad \{\hat{L}_z,\hat{L}_x\}=i\hat{L}_y,\qquad \{\hat{L}_x,\hat{L}_y\}=i\hat{L}_z \tag{26.8}$$

となる．

(26.8) の関係は，角運動量の3成分が（同時にゼロになる場合を除いて——以下参照）同時に確定値をとることはできないことを示している．この点で，3成分が同時に確定値をとることのできる運動量と角運動量は，本質的に異なっている．

演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ から角運動量ベクトルの絶対値の自乗の演算子

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2 \tag{26.9}$$

をつくろう．この演算子は演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ のいずれとも可換である：

$$\{\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_x\}=0,\qquad \{\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_y\}=0,\qquad \{\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z\}=0. \tag{26.10}$$

たとえば，(26.8) を用いると

$$\{\hat{L}_x^2,\hat{L}_z\}=\hat{L}_x\{\hat{L}_x,\hat{L}_z\}+\{\hat{L}_x,\hat{L}_z\}\hat{L}_x=-i(\hat{L}_x\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_x),$$
$$\{\hat{L}_y^2,\hat{L}_z\}=i(\hat{L}_x\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_x),$$
$$\{\hat{L}_z^2,\hat{L}_z\}=0$$

となり，これらの等式を加え合わせると，たしかに，$\{\hat{L}^2,\hat{L}_z\}=0$ が得られる．

物理的には，(26.10) の関係は，角運動量の自乗（したがってその絶対値）とその成分のうちのいずれか一つは同時に確定値をとりうることを示している．

演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ のかわりに，それらの複素結合演算子

$$\hat{L}_+=\hat{L}_x+i\hat{L}_y,\qquad \hat{L}_-=\hat{L}_x-i\hat{L}_y \tag{26.11}$$

を用いると便利なことがしばしばある．

(26.8) を使って直接計算すれば容易に確かめられるように，これらの複素結合に対しては次の交換則が成り立つ：

$$\{\hat{L}_+,\hat{L}_-\}=2\hat{L}_z,\quad \{\hat{L}_z,\hat{L}_+\}=\hat{L}_+,\quad \{\hat{L}_z,\hat{L}_-\}=-\hat{L}_-. \tag{26.12}$$

また次の式を証明するのも容易である：

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2=\hat{L}_+\hat{L}_-+\hat{L}_z^2-\hat{L}_z=\hat{L}_-\hat{L}_++\hat{L}_z^2+\hat{L}_z. \tag{26.13}$$

最後に，よく用いられる個別粒子の角運動量の球座標による表式を書いておこう．球座標を通常の関係

$$x=r\sin\theta\cos\varphi,\quad y=r\sin\theta\sin\varphi,\quad z=r\cos\theta$$

によって導入すると，簡単な計算から次の式が得られる：

$$\hat{l}_z=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{26.14}$$

$$\hat{l}_\pm=e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{26.15}$$

これを (26.13) に代入すれば，粒子の角運動量の自乗の演算子が次の形で得られる：

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2=-\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]. \tag{26.16}$$

これは係数を除いてラプラス演算子の角度部分であることに注意しよう．

§ 27. 角運動量の固有値

粒子の角運動量のある方向に対する投影の固有値を求めるためには，この方向に極軸をとった極座標でその演算子をあらわすと便利である．公式 (26.14) によれば，方程式 $\hat{l}_z\psi=l_z\psi$ は次の形に書かれる：

$$-i\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}=l_z\psi. \tag{27.1}$$

この解は

$$\psi=f(r,\theta)e^{il_z\varphi}$$

である．ここで $f(r,\theta)$ は r と θ の任意の関数である．関数 ψ が1価関数であるためには，ψ は 2π を周期とする φ の周期関数でなければならない．このこ

とから次の関係が得られる[1]：

$$l_z=m, \qquad m=0, \pm1, \pm2, \cdots. \tag{27.2}$$

したがって，l_z の固有値はゼロを含む正負の整数に等しい，演算子 $\hat{l}_z$ の固有関数をあらわす φ に依存する因子を

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \tag{27.3}$$

と書こう．この関数は

$$\int_0^{2\pi}\Phi_m^*(\varphi)\Phi_{m'}(\varphi)d\varphi=\delta_{mm'} \tag{27.4}$$

となるように規格化されている．

系の全角運動量の z 成分の固有値も，明らかに正負の整数値に等しい：

$$L_z=M, \qquad M=0, \pm1, \pm2, \cdots \tag{27.5}$$

(これは演算子 $\hat{L}_z$ が互いに可換な個別粒子の演算子 $\hat{l}_z$ の和であることから出てくる)．

z 軸の方向をあらかじめ選りごのみする理由はないので，$\hat{L}_x, \hat{L}_y$ について，またより一般的に任意の方向の角運動量成分についても同じ結果が得られることは明らかである．すなわち，これらの値はすべて整数値しかとらない．この結果は一見パラドックスのように見えるかもしれない；無限に近接した二つの方向をとって見れば特にそうであろう．しかし実際には，演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ に共通な固有関数はたった一つだけあって，それに対応する同時共存の固有値は

$$L_x=L_y=L_z=0$$

であることを思い起こす必要がある；この場合には角運動量ベクトルおよび任意の方向へのその投影はゼロに等しい．ところが，もしも固有値 L_x, L_y, L_z のうちに一つでもゼロでないのがあれば，演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ には共通の固有関数は存在しない．いいかえれば，二つあるいは三つの異なる方向の角運動量成分が同時に（ゼロでない）確定値をとるような状態は存在しない．したがってわれわれはそれらのうちの1成分の整数性だけをいうことができるのである．

M の値だけが異なる系の定常状態は同一のエネルギーをもっている；このことは z 軸が特別に選ばれた方向ではないことを考慮すれば一般的に導かれる．

1）角運動量の投影の固有値を一般に文字 m であらわすが．これは粒子の質量のあらわし方と同じである．しかし実際には混同することはない．

したがって（ゼロでない）角運動量が保存される系のエネルギー準位は必ず縮退している[1]．

つぎに角運動量の自乗 $\boldsymbol{L}^2$ の固有値を求めることに進もう．(26.8) の交換関係だけから出発してこの値を求めてみよう．一つの縮退したエネルギー準位に属し，$\boldsymbol{L}^2$ の値が同じでしかも M の値によって区別される定常状態の波動関数を ψ_M であらわす[2]．

まずはじめに，z 軸の二方向は物理的に同等なので，可能な正の値 $M=|M|$ のそれぞれに応じて，負の値 $M=-|M|$ が存在する．($\boldsymbol{L}^2$ を与えたときの) $|M|$ の可能な最大値を L（正の整数かゼロ）であらわそう．このような上限が存在することは，差 $\hat{\boldsymbol{L}}^2-L_z^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2$ が，本質的に正の物理量 $L_x^2+L_y^2$ の演算子であること，したがって，その固有値は負になり得ないことから導かれる．

さらに演算子 $\hat{L}_z\hat{L}_\pm$ を演算子 $\hat{L}_z$ の固有関数 ψ_M に作用させ，交換則 (26.12) を用いれば

$$\hat{L}_z\hat{L}_\pm\psi_M=(M\pm1)\hat{L}_\pm\psi_M \tag{27.6}$$

が得られる．これからわかるように，関数 $\hat{L}_\pm\psi_M$ は（規格化定数を除いて）量 L_z の値が $M\pm1$ に対応する固有関数である．したがって次のように書くことができる：

$$\begin{aligned}\psi_{M+1}&=\mathrm{const}\cdot\hat{L}_+\psi_M\,,\\ \psi_{M-1}&=\mathrm{const}\cdot\hat{L}_-\psi_M\,.\end{aligned} \tag{27.7}$$

もしもこの第一の等式中で $M=L$ と置けば，恒等的に

$$\hat{L}_+\psi_L=0 \tag{27.8}$$

---

1) この事情は，§10 で述べた少なくとも二つの保存量が存在して対応する演算子が互いに非可換な場合の，準位の縮退に関する一般定理の特別な場合である．ここでは各角運動量の成分がこのような量になっている．

2) ここでは．角運動量の自乗の異なる値に対して同一のエネルギー値を与えるようなよけいな縮退はないものと仮定している．この仮定は離散的スペクトルについては成り立つが（クーロン場のなかでのいわゆる《偶然縮退》の場合は除く，§36参照），連続スペクトルのエネルギー準位については一般に成り立たない．しかしこのようなよけいな縮退が存在する場合でも，$\boldsymbol{L}^2$ の確定値に対応するように固有関数を選んで，しかるのちに同じ E と $\boldsymbol{L}^2$ の値をもつ状態をそのなかから選び出すことはつねに可能である．数学的に表現すれば，これは互いに可換な演算子の行列は同時に対角形にすることが常に可能ということである．そのようなわけで，実際に得られる結果はこのような仮定には依存しないので，以下では簡単のためによけいな縮退が存在する場合にも，あたかもよけいな縮退が一つも存在しないかのように話をすすめることにしよう．

とならなければならない；$M>L$ の状態は定義によって存在しないからである．この式に演算子 $\hat{L}_-$ を作用させ，(26.13) の関係を用いると

$$\hat{L}_-\hat{L}_+\psi_L=(\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hat{L}_z^2-\hat{L}_z)\psi_L=0$$

が得られる．ところが ψ_M は演算子 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ に共通な固有関数であるから

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi_L=\boldsymbol{L}^2\psi_L, \qquad \hat{L}_z^2\psi_L=L^2\psi_L, \qquad \hat{L}_z\psi_L=L\psi_L$$

である．したがって上に得られた方程式から

$$\boldsymbol{L}^2=L(L+1) \tag{27.9}$$

が得られる．

求める角運動量の自乗の固有値はこの式 (27.9) によって決定される；数 L はゼロを含むすべての正の整数値をとる．L の値が与えられている場合に角運動量の成分 $L_z=M$ は次の値

$$M=L, L-1, \cdots, -L, \tag{27.10}$$

すなわち全部で $2L+1$ 個の異なる値をとる．したがって角運動量 L に対応するエネルギー準位は，$(2L+1)$ 重に縮退している．この縮退は，角運動量の方向に関する縮退と呼びならわされている．角運動量がゼロ，すなわち $L=0$ の状態（このとき3成分はすべてゼロ）は縮退していない．このような状態の波動関数は球対称であることに注意しよう．このことは式 $\hat{\boldsymbol{L}}\psi$ で与えられる任意の微小回転を行なっても，いまの場合その変化がゼロになることから明らかである．

慣用に従ってしばしば系の《角運動量 L》とかんたんにいうことがあるが，これは角運動量の自乗が $L(L+1)$ に等しいことを意味する．そして，角運動量の z 成分のことは，かんたんに，《角運動量の投影》と呼ぶことが多い．一個の粒子の角運動量は小文字 l で表わし，公式 (27.9) を

$$\boldsymbol{l}^2=l(l+1) \tag{27.11}$$

と書くことにしよう．

エネルギーとならんで $\boldsymbol{L}^2$ と L_z が対角な表示において，L_x と L_y の行列要素を計算しよう (M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, 1926)．まずはじめに演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ はハミルトニアンと可換であるから，その行列はエネルギーについて対角であることに注意しよう．すなわち異なるエネルギー（および異なる角運動量 L）の状態間の遷移に対する行列要素はゼロである．したがって一

つの縮退したエネルギー準位に属し，しかも M の異なる状態のあいだの遷移に対する行列要素を考えれば十分である．

公式 (27.7) から明らかなように，演算子 $\hat{L}_+$ の行列では遷移 $M-1\rightarrow M$ に対応する行列要素だけが，また演算子 $\hat{L}_-$ の行列では $M\rightarrow M-1$ 行列要素だけがゼロでない．このことを考慮して式 (26.13) の両辺の対角行列要素を求めると次式が得られる[1]．

$$L(L+1)=\langle M|L_+|M-1\rangle\langle M-1|L_-|M\rangle+M^2-M.$$

演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ のエルミート性によって

$$\langle M-1|L_-|M\rangle=\langle M|L_+|M-1\rangle^*$$

となることに注意すれば，上の等式は次の形に書きかえられる：

$$|\langle M|L_+|M-1\rangle|^2=L(L+1)-M(M-1)=(L-M+1)(L+M).$$

これから

$$\langle M|L_+|M-1\rangle=\langle M-1|L_-|M\rangle=\sqrt{(L+M)(L-M+1)} \qquad (27.12)$$

となる[2]．

したがって L_x および L_y 自身のゼロでない行列要素は：

$$\langle M|L_x|M-1\rangle=\langle M-1|L_x|M\rangle=\frac{1}{2}\sqrt{(L+M)(L-M+1)},$$

$$\langle M|L_y|M-1\rangle=-\langle M-1|L_y|M\rangle=-\frac{i}{2}\sqrt{(L+M)(L-M+1)}. \qquad (27.13)$$

L_x, L_y の行列には対角要素がないことに注意しよう．対角行列要素は，それに対応する状態での平均値を与えるので，このことは，L_z が確定値をもつ状態では，平均値が $\bar{L}_x=\bar{L}_y=0$ となることを意味している．したがって，空間のある方向への角運動量の投影が，もし確定値をとれば，全ベクトル $\bar{\boldsymbol{L}}$ も同じ方向を向いている．

§ 28. 角運動量の固有関数

l と m の値が与えられても粒子の波動関数は完全には決まらない．このことは，これらの量の演算子の球座標による表式が角度 θ と φ だけを含んでおり，

1) かんたんのために，行列要素の記号のうちでそれが対角となるような添字は（添字 L を含めて）すべて落とした．

2) この公式の符号の選び方は（次節の，訳者）角運動量の固有関数の位相因子の選び方と合わせてある．

したがって固有関数には r に依存する任意の因子を含めてもよいことから自明である．ここでは角運動量の固有関数に特有な波動関数の角度部分だけを考察する．これを $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ であらわし，次の条件で規格化する：

$$\int |Y_{lm}|^2 do=1$$

($do=\sin\theta d\theta d\varphi$ は立体角要素)．

以下の計算からわかるように演算子 $\hat{l}^2$ と $\hat{l}_z$ の共通の固有関数を求める問題では，変数 θ と φ の分離が許されて，この関数を次の形に求めることができる：

$$Y_{lm}=\Phi_m(\varphi)\Theta_{lm}(\theta). \qquad (28.1)$$

ここで $\Phi_m(\varphi)$ は，式 (27.3) で定義される演算子 $\hat{l}_z$ の固有関数である．関数 Φ_m は条件 (27.4) によってすでに規格化されているから，Θ_{lm} は条件

$$\int_0^\pi |\Theta_{lm}|^2 \sin\theta d\theta=1 \qquad (28.2)$$

によって規格化されなければならない．

異なる l あるいは m をもつ関数 Y_{lm} は，異なる固有値に属する角運動量の固有関数であるから，自動的に直交している：

$$\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y^*_{l'm'}Y_{lm}\sin\theta d\theta d\varphi=\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad (28.3)$$

関数 $\Phi_m(\varphi)$ は演算子 $\hat{l}_z$ の異なる固有値 m に属する固有関数として，それだけで別個に直交している ((27.4) 参照)．しかし関数 $\Theta_{lm}(\theta)$ はそれだけではいかなる角運動量演算子の固有関数でもない．それは異なる l に対しては直交しているが，異なる m に対しては直交していない．

求める関数 $\Theta_{lm}(\theta)$ を計算するためのもっとも直接的な方法は，球座標で書かれた演算子 $\hat{l}^2$ (26.16) の固有関数を求める問題を直接解くことである．方程式 $\hat{l}^2\psi=l^2\psi$ は

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+l(l+1)\psi=0$$

となる．この方程式に (28.1) の形の ψ を代入すると，関数 Θ_{lm} に対して次の方程式が得られる：

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta_{lm}}{d\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta_{lm}+l(l+1)\Theta_{lm}=0. \qquad (28.4)$$

これは球関数の理論でよく知られた方程式である．これは正の整数 $l \geqq |m|$ に対して，有界性と一意性の条件を満たす解をもち，この m の値はさきに行列の方法で求めた角運動量の固有値と一致している．対応する解はいわゆるルジャンドルの陪多項式 $P_l^m(\cos\theta)$ である（数学的補遺 § c 参照）．（28.2）の条件によって解を規格化すれば，次式が得られる[1]：

$$\Theta_{lm}(\theta)=(-1)^m i^l\sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta). \tag{28.5}$$

ここで $m \geqq 0$ と仮定している．負の m に対する Θ_{lm} は関係式

$$\Theta_{l,-|m|}=(-1)^m\Theta_{l|m|} \tag{28.6}$$

で与えられる．すなわち，$m<0$ のときの Θ_{lm} をあらわすには，公式（28.5）の中で m のかわりに $|m|$ と書き，また乗数 $(-1)^m$ を落としてやればよい．

このように角運動量の固有関数は数学的に見れば，一定の方式で規格化された球関数に他ならないことがわかった．あとで引用するのに便利なように，上述の定義を全部考慮した完全な表式を書いておこう：

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^{(m+|m|)/2}i^l\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi}, \tag{28.7}$$

とくに

$$Y_{l0}=i^l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta) \tag{28.8}$$

となる．明らかに m の符号だけが異なる関数は次の関係で互いに結ばれている：

$$(-1)^{l-m}Y_{l,-m}=Y_{lm}^*. \tag{28.9}$$

$l=0$（したがって $m=0$）のときには，球関数は定数になる．いいかえれば角運動量ゼロの粒子の状態の波動関数は r だけに依存する．すなわち完全な球対称性をもつ，これは § 27 で述べた一般論と合っている．

m を与えると l の値は $|m|$ から始まって大きい方へ順に進み量 l^2 の固有値を作っていく．それゆえ固有関数のゼロ点に関する一般論（§ 21）によって，関

1）位相因子の選び方は，もちろん規格化条件からは決まらない．本書で用いる（28.5）の定義は，角運動量の合成の一般論の観点から見てもっとも自然なものである．これはふつうよく用いられているものと因子 i^l だけ異なっている．このような選び方の方が優れていることは，257 頁の脚注および下巻の § 106，107 の脚注から明らかにされるだろう．

数 Θ_{lm} は角度 θ の $l-|m|$ 個の異なる値でゼロになると結論できる．いいかえれば，それは球上に $l-|m|$ 本の節線を《緯度》に沿ってえがく．全角度関数の中で，$e^{\pm i|m|\varphi}$ のかわりに実因子 $\cos m\varphi$ あるいは $\sin m\varphi$ を選べば[1)]，さらに $|m|$ 本の節線が《子午線》に沿ってえがかれることになる；したがって節線の総数は l 本である．

最後に行列の方法で関数 Θ_{lm} を計算するしかたを示そう．これは§23で振動子の波動関数を計算したのと同様に行なうことができる．式 (27.8) $\hat{l}_+\psi_{ll}=0$ から出発する．演算子 $\hat{l}_+$ の表式 (26.15) を用い

$$Y_{ll}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{il\varphi}\Theta_{ll}(\theta)$$

を代入すると，Θ_{ll} に対する方程式

$$\frac{d\Theta_{ll}}{d\theta}-l\cot\theta\,\Theta_{ll}=0$$

が得られる．これから $\Theta_{ll}=\mathrm{const}\cdot\sin^l\theta$ である．規格化条件から定数を決めると次式が得られる：

$$\Theta_{ll}=(-i)^l\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}\frac{1}{2^l l!}\sin^l\theta. \tag{28.10}$$

さらに (27.12) を用いると

$$\hat{l}_-Y_{l,m+1}=(l_-)_{m,m+1}Y_{lm}=\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,Y_{lm}$$

と書ける．この公式をくり返し適用すると：

$$\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}Y_{lm}=\frac{1}{\sqrt{(2l)!}}\hat{l}_-^{\,l-m}Y_{ll}.$$

この等式の右辺の計算は演算子 $\hat{l}_-$ の表式 (26.15) を用いれば容易に行なうことができる．それによると

$$\hat{l}_-[f(\theta)e^{im\varphi}]=e^{i(m-1)\varphi}\sin^{1-m}\theta\frac{d}{d\cos\theta}(f\sin^m\theta)$$

である．この式をくり返し適用すれば：

$$\hat{l}_-^{\,l-m}e^{il\varphi}\Theta_{ll}=e^{im\varphi}\sin^{-m}\theta\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}(\sin^l\theta\cdot\Theta_{ll}).$$

最後にこの関係と Θ_{ll} の表式 (28.10) を用いれば次の公式を得る：

---

1)　このような関数はいずれも l_z が確定値をとらず，等しい確率で $\pm m$ の値をとる状態に対応している．

$$\Theta_{lm}(\theta)=(-i)^l\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\frac{1}{2^l l!\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}\sin^{2l}\theta. \quad (28.11)$$

これは (28.5) と一致する.

§ 29. ベクトルの行列要素

ふたたび閉じた粒子系を考察しよう[1]. この系を特徴づける任意のスカラー物理量を f とし, この量に対応する演算子を $\hat{f}$ とする. すべてのスカラーは座標系の回転に対し不変である. それゆえスカラー演算子 $\hat{f}$ は回転操作を加えても変化しない. すなわち回転演算子と可換である. ところがわれわれは無限小回転の演算子が定因子を除いて角運動量演算子と一致することを知っている. したがって

$$\{\hat{f},\hat{\boldsymbol{L}}\}=0 \quad (29.1)$$

である.

$\hat{f}$ と角運動量演算子が可換なので, L と M が確定値をとる状態間の遷移に関係した量 f の行列は, これらの添字について対角的になる. さらに, 数 M を与えることによって決まるのは, 体系の座標軸に対する傾きだけなので, そして, スカラー量の値は一般にこの傾きにはよらないので, 行列要素 $\langle n'LM|f|nLM\rangle$ は M に依存しないと言うことができる (系の状態を指定する量子数のうち L, M 以外のものは全部まとめて n であらわしている). この主張を式の上で証明するためには $\hat{f}$ と $\hat{L}_+$ の可換性

$$\hat{f}\hat{L}_+-\hat{L}_+\hat{f}=0 \quad (29.2)$$

を用いるとよい. この等式の $n, L, M\to n', L, M+1$ なる遷移に対応する行列要素を書いてみよう. 量 L_+ の行列は $n, L, M\to n, L, M+1$ の要素しかもたないことを考えれば

$$\begin{aligned}\langle n',L,M+1|f|n,L,M+1\rangle\langle n,L,M+1|L_+|n,L,M\rangle\\=\langle n',L,M+1|L_+|n',L,M\rangle\langle n',L,M|f|n,L,M\rangle\end{aligned}$$

が得られる. そして, L_+ の行列要素は添字 n に依存しないので

$$\langle n',L,M+1|f|n,L,M+1\rangle=\langle n',L,M|f|n,L,M\rangle \quad (29.3)$$

---

1) この節のすべての結果は, 中心対称場の中の粒子に対しても (一般的には系の全角運動量が保存する場合にはいつでも) 成り立つ.

となる．これから，一般に異なる M をもつ $\langle n', L, M|f|n, L, M\rangle$（ただし他の添字は同一）はすべて互いに等しくなければならない．

この結果をハミルトニアン自身に適用すれば，すでにわれわれのよく知っている定常状態のエネルギーは M に依存しないこと，すなわちエネルギー準位は $(2L+1)$ 重に縮退していることが導かれる．

つぎに閉じた系を特徴づけるあるベクトル物理量を $\boldsymbol{A}$ としよう．座標系を回転したとき（特に無限小回転の演算子，すなわち角運動量演算子を作用したとき）ベクトルの成分は相互に変換する．それゆえ演算子 $\hat{L}_i$ と $\hat{A}_i$ の交換子をつくれば，ふたたび同じベクトルの成分 $\hat{A}_i$ が得られるはずである．では実際にはどうなるのか．それを求めるには，$\boldsymbol{A}$ が粒子の動径ベクトルである特別な場合には公式 (26.4) が得られなければならないことに注意すればよい．したがって，次の交換則が得られる：

$$\{\hat{L}_i, \hat{A}_k\} = ie_{ikl}\hat{A}_l. \tag{29.4}$$

この関係式からベクトル $\boldsymbol{A}$ の成分の行列の形についていくつかの結果を導くことができる（M. Born，W. Heisenberg，P. Jordan，1926）．まず第一に，どのような遷移に対して行列要素がゼロでないかを決める**選択規則**を求めることができる．しかしここではそのために必要なかなり面倒な計算は行なわないことにする．そのわけはあとで明らかになるように（§107），この規則はベクトル量の一般的な変換性の直接の帰結であって，ほとんど何も計算せずに導かれるからである．したがってここでは導き方は示さずに規則だけを引用しておこう．

すべてのベクトルの成分の行列要素は，角運動量 L の変化が 1 より大きくならない遷移

$$L \longrightarrow L, L\pm 1 \tag{29.5}$$

に対してだけゼロでない．この他に $L=0$ なるすべての 2 状態間の遷移を禁止する選択則も存在する．この規則は明らかに角運動量ゼロの状態が完全球対称であることからの当然の帰結である．

ベクトルの成分によって角運動量の射影 M についての選択則が異なる．すなわち行列要素がゼロでないのは M の値がつぎのように変化する場合である：

$$
\begin{aligned}
&A_+=A_x+iA_y \quad \text{に対して} \quad M\to M+1,\\
&A_-=A_x-iA_y \quad \text{に対して} \quad M\to M-1,\\
&A_z \quad \text{に対して} \quad M\to M.
\end{aligned}
\tag{29.6}
$$

つぎに，ベクトルの行列要素の数 M への依存性を一般的な形で求めることが可能である．この重要でよく用いられる公式も，実は§107で求める（任意のテンソル量に関する）より一般的な関係式の特別な場合になっているので，ここでは導き方を示さずに引用だけしておこう．

量 A_z のゼロでない行列要素は次の公式で与えられる：

$$
\begin{aligned}
\langle n'LM|A_z|nLM\rangle &= \frac{M}{\sqrt{L(L+1)(2L+1)}}\langle n'L\|A\|nL\rangle,\\
\langle n'LM|A_z|n,L-1,M\rangle &= \sqrt{\frac{L^2-M^2}{L(2L-1)(2L+1)}}\langle n'L\|A\|n,L-1\rangle,\\
\langle n',L-1,M|A_z|nLM\rangle &= \sqrt{\frac{L^2-M^2}{L(2L-1)(2L+1)}}\langle n',L-1\|A\|nL\rangle.
\end{aligned}
\tag{29.7}
$$

ここで，記号

$$\langle n'L'\|A\|nL\rangle$$

は，いわゆる**既約行列要素**で，量子数 M に依存しない量である[1]．これらは演算子 $\hat{A}_z$ のエルミート性から直接導かれる関係式

$$\langle n'L'\|A\|nL\rangle=\langle nL\|A\|n'L'\rangle^* \tag{29.8}$$

によって相互に結ばれている．

量 A_- と A_+ の行列要素もまた同じ既約要素を用いてあらわされる．A_- のゼロでない行列要素はつぎのとおりである．

$$
\begin{aligned}
\langle n',L,M-1|A_-|nLM\rangle &= \sqrt{\frac{(L-M+1)(L+M)}{L(L+1)(2L+1)}}\langle n'L\|A\|nL\rangle,\\
\langle n',L,M-1|A_-|n,L-1,M\rangle &= \sqrt{\frac{(L-M+1)(L-M)}{L(2L-1)(2L+1)}}\langle n'L\|A\|n,L-1\rangle\\
\langle n',L-1,M-1|A_-|nLM\rangle &= -\sqrt{\frac{(L+M-1)(L+M)}{L(2L-1)(2L+1)}}\langle n',L-1\|A\|nL\rangle.
\end{aligned}
\tag{29.9}
$$

---

1) 公式（29.7），（29.9）には L に依存する分母があらわれているが，これは§107で導入する一般的記号に合わせるためである．このような分母があった方がよいことは，たとえば二つのベクトルのスカラー積の行列要素が公式（29.12）のように簡単な形になることからも明らかである．

既約行列要素の記号は，分解のできない全体で一つのものと考えなければならない（これは行列要素の記号（11.17）について述べたことと異なる）．

A_+ の行列要素を求めるためには特別な公式は要らない．なぜならば A_x と A_y が実数であるため

$$\langle n'L'M'|A_+|nLM\rangle=\langle nLM|A_-|n'L'M'\rangle^* \tag{29.10}$$

となるからである．

スカラー $\boldsymbol{AB}$ の行列要素を二つのベクトル量 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ の既約行列によって表わす公式を考えよう．この計算は演算子 $\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{B}}$ を次のように書いておくと，やりやすい：

$$\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{B}}=\frac{1}{2}(\hat{A}_+\hat{B}_-+\hat{A}_-\hat{B}_+)+\hat{A}_z\hat{B}_z. \tag{29.11}$$

（すべてのスカラーと同様に）$\boldsymbol{AB}$ の行列要素が L と M に関して対角である．公式 (29.7)-(29.9) を用いて計算すると次の結果が得られる：

$$\langle n'LM|\boldsymbol{AB}|nLM\rangle=\frac{1}{2L+1}\sum_{n'',L''}\langle n'L\|A\|n''L''\rangle\langle n''L''\|B\|nL\rangle. \tag{29.12}$$

ここで L'' は値 $L, L\pm1$ をとる．

参考までに，ベクトル $\boldsymbol{L}$ 自身の既約行列を書いておこう．公式 (29.9) と (27.12) を比較すると，つぎのようになる：

$$\langle L\|L\|L\rangle=\sqrt{L(L+1)(2L+1)},\quad \langle L-1\|L\|L\rangle=\langle L\|L\|L-1\rangle=0. \tag{29.13}$$

粒子の動径ベクトルの方向の単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ は，実際の計算によくあらわれる量である．これの既約行列要素を求めよう．そのためには，たとえば角運動量の投影がゼロ，すなわち $m=0$ の場合に $n_z=\cos\theta$ の行列要素を計算すれば十分である．(28.11) から得られる関数 Θ_{l0} を使えば

$$\langle l-1,0|n_z|l0\rangle=\int_0^\pi\Theta^*_{l-1,0}\cos\theta\Theta_{l0}\sin\theta d\theta$$

となる．積分を計算すると次のようになる[1]：

$$\langle l-1,0|n_z|l0\rangle=il/\sqrt{(2l-1)(2l+1)}.$$

遷移 $l\to l$ に対応する行列要素は（個別粒子に関係するすべての極性ベクトルと同様に——以下の (30.8) 参照）ゼロである．(29.7) と比較すると，結局

$$\langle l-1\|n\|l\rangle=-\langle l\|n\|l-1\rangle=i\sqrt{l},\quad \langle l\|n\|l\rangle=0. \tag{29.14}$$

となる．

---

1)　この計算は，$d\cos\theta$ について $(l-1)$ 回部分積分することによって行なわれる．このような積分の一般形は (107.14) 参照．

問　　題

ベクトル量 $\boldsymbol{l}$ の絶対値は与えられているがその方向は与えられていない（すなわち l_z が未定の）状態におけるテンソル $n_i n_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}$ の平均を求めよ（ここで $\boldsymbol{n}$ は粒子の動径方向の単位ベクトル）．

解　求める平均値は演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ だけであらわされる演算子である．これを次の形に求めよう：

$$\overline{n_i n_k} - \frac{1}{3}\delta_{ik} = a\left[\hat{l}_i\hat{l}_k + \hat{l}_k\hat{l}_i - \frac{2}{3}\delta_{ik} l(l+1)\right].$$

これは $\boldsymbol{l}$ の成分からつくられる2階の対称テンソルのうちで対角和がゼロとなるもっとも一般的な形である．定数 a を決定するために上記の式の左から $\hat{l}_i$ を掛け右から $\hat{l}_k$ を掛けよう（そして i と k については和をとる）．ベクトル $\boldsymbol{n}$ はベクトル $\hbar\hat{\boldsymbol{l}} = [\hat{\boldsymbol{r}}\hat{\boldsymbol{p}}]$ に垂直であるから，$n_i\hat{l}_i = 0$ である．積 $\hat{l}_i\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_k = (\hat{\boldsymbol{l}}^2)^2$ をその固有値 $l^2(l+1)^2$ で置きかえる．また積 $\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_i\hat{l}_k$ は交換関係（26.7）を用いて次のように変換する：

$$\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_i\hat{l}_k = \hat{l}_i\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_k - ie_{ikl}\hat{l}_i\hat{l}_l\hat{l}_k = (\hat{\boldsymbol{l}}^2)^2 - \frac{i}{2}e_{ikl}\hat{l}_i(\hat{l}_l\hat{l}_k - \hat{l}_k\hat{l}_l)$$

$$= (\hat{\boldsymbol{l}}^2)^2 + \frac{1}{2}e_{ikl}e_{lkm}\hat{l}_i\hat{l}_m = (\hat{\boldsymbol{l}}^2)^2 - \hat{\boldsymbol{l}}^2 = l^2(l+1)^2 - l(l+1)$$

（ここで $e_{ikl}e_{mkl} = 2\delta_{im}$ を用いた）．簡単な約分を行なうと次の結果が得られる：

$$a = -\frac{1}{(2l-1)(2l+3)}.$$

§ 30．状態の偶奇性

座標系の平行移動と回転（これらに関する不変性は，それぞれ空間の一様性と等方性をあらわしている）の他に，閉じた系のハミルトニアンを不変に保つもう一つの変換が存在する．これはすべての座標の符号を同時に変える，すなわち，すべての軸の向きを逆転するいわゆる**反転**変換である．これによって，右手系は左手系に，左手系は右手系に移る．この変換に関するハミルトニアンの不変性は，鏡映に関する空間の対称性をあらわしている[1]．古典力学では反転に関するハミルトン関数の不変性からはいかなる保存則も導かれない．ところが量子力学では事情は本質的に異なっている．

反転の演算子を $\hat{P}$ であらわそう[2]．これを関数に作用させると座標の符号が変わる．

1）中心対称の場におかれた粒子系のハミルトニアンも反転に関して不変である（このときは座標系の原点は，場の中心と一致していなければならない）．

2）偶奇性をあらわす英語の parityから採った．

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{r})=\psi(-\boldsymbol{r}). \tag{30.1}$$

方程式

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{r})=P\psi(\boldsymbol{r}) \tag{30.2}$$

によって定義される反転演算子の固有値 P を求めるのは容易である.

このためには反転演算子を二度作用させるともとにもどること，すなわち関数の引数が一般に変化しないことに注意する．いいかえれば $\hat{P}^2\psi=P^2\psi=\psi$, すなわち $P^2=1$ である．これから

$$P=\pm 1 \tag{30.3}$$

となる．したがって反転演算子の固有関数は，この演算子を作用させたときその符号を変えないか，あるいは変えるかのどちらかである．第一の場合には波動関数（とそれに対応する状態）は**偶**，第二の場合には**奇**と呼ばれる.

反転に関するハミルトニアンの不変性（すなわち，演算子 $\hat{H}$ と $\hat{P}$ の可換性）は**偶奇性の保存則**をあらわしている．もしも閉じた系の状態がある特定の偶奇性をもつと（それが偶であるか，奇であれば），その偶奇性は時間をへても保存される.

同じように，角運動量も反転に関して不変である．反転は座標と座標についての微分演算子の符号を変える．しかし演算子（26.2）は不変に保つからである．換言すれば，反転演算子は角運動量演算子と可換である．これは，系が角運動量 L とその投影 M の一定値と同時に，一定の偶奇性ももちうることを意味している．このとき M の値だけが異なる状態は同一の偶奇性をもっていることがわかる．このことは，閉じた系の性質が空間の中でのその方位には依存しないことから自明であるが，形式的には，（29.2）から（29.3）を導いたのと同じやり方で，交換子 $\hat{L}_+\hat{P}-\hat{P}\hat{L}_+=0$ から出発して証明することができる.

物理量の中には，その行列要素に関して一定の**偶奇性の選択則**をもつものがある.

はじめにスカラー量を考えよう．このとき，反転に対してまったく不変の**真性スカラー**と，反転に対して符号を変える**擬スカラー**を区別しなければならない（擬スカラーは軸性ベクトルと極性ベクトルのスカラー積である)．真性スカラー f の演算子は $\hat{P}$ と可換である．これから，行列 P が対角ならば行列 f も偶奇性の添字について対角であること，すなわち，行列要素は遷移 $g\to g$ と

$u\to u$ に対してだけゼロでないことが導かれる（ここで，g と u はそれぞれ偶状態と奇状態をあらわしている）．擬スカラー量の演算子では $\hat{P}\hat{f}=-\hat{f}\hat{P}$ が成り立つ．すなわち，演算子 $\hat{P}$ と $\hat{f}$ は《反可換》である．この等式の遷移 $g\to g$ に対する行列要素は

$$P_{gg}f_{gg}=-f_{gg}P_{gg}$$

である．$P_{gg}=1$ であるから，$f_{gg}=0$ となる．同様にして $f_{uu}=0$ もえられる．したがって，擬スカラー量の行列は偶奇性を変える遷移に対してだけゼロでない行列要素をもつことになる．こうして，スカラー量の行列要素に対する選択則は次のようになる：

$$\begin{aligned}&\text{真性スカラー：}\quad g\to g,\quad u\to u,\\&\text{擬スカラー}\quad\text{：}\quad g\to u,\quad u\to g.\end{aligned}\qquad(30.4)$$

この選択則は別の方法，すなわち行列要素の定義そのものから直接導くことができる．例えば，積分 $f_{ug}=\int\psi_u^*\hat{f}\psi_g dq$ を考えよう．ここで関数 ψ_g は偶，ψ_u は奇である．すべての座標の符号を変えると，被積分式は，f が真性スカラーであれば符号を変える．他方，全空間にわたって行なわれる積分は，積分変数の記号を変えても変わらない．これから $f_{ug}=-f_{ug}$，すなわち $f_{ug}\equiv 0$ が導かれる．

同様にしてベクトル量に対する選択則を求めることができる．ここで覚えておかなければならないのは，ふつうの極性ベクトルは反転に対して符号を変えるが，軸性ベクトルはこの変換に対して不変である（その例は，角運動量ベクトルである．これは二つの極性ベクトル $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{r}$ のベクトル積になっている）．このことを考慮すると，次の選択則が得られる：

$$\begin{aligned}&\text{極性ベクトル：}\quad g\to u,\quad u\to g,\\&\text{軸性ベクトル：}\quad g\to g,\quad u\to u.\end{aligned}\qquad(30.5)$$

角運動量 l をもった1粒子の状態の偶奇性を決定しよう．反転変換（$x\to -x$, $y\to -y$, $z\to -z$）は，球座標上では次の変換となる：

$$r\to r,\quad \theta\to\pi-\theta,\quad \varphi\to\varphi+\pi.\qquad(30.6)$$

粒子の波動関数の角度依存性は球関数 Y_{lm} で与えられるが，これは，いまわれわれにとって重要でない定数を除くと $P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$ という形をしている．φ を $\varphi+\pi$ に変えると，因子 $e^{im\varphi}$ は $(-1)^m$ 倍される，また θ を $\pi-\theta$ に変えると，

$P_l^m(\cos\theta)$ は $P_l^m(-\cos\theta)=(-1)^{l-m}P_l^m(\cos\theta)$ に移る．したがって，関数全体には因数 $(-1)^l$ がかかる（これは上述の通り m には依存しない）．したがって，一定値 l をもつ状態の偶奇性は

$$P=(-1)^l \tag{30.7}$$

である．これから，偶数の l をもつ状態はすべて偶，奇数の l をもつ状態は奇状態であることがわかる．

個別粒子に関するベクトル物理量は，$l\to l, l\pm1$ となる遷移に対してだけ有限の行列要素をもつ（§29）．このことを考慮し，またベクトルの行列要素の中での偶奇性の変化に関して上で述べたことと (30.7) を使うと，次のような結論がえられる．すなわち，個別粒子に関するベクトル量の行列要素がゼロでないのは，次のような遷移の場合だけである：

$$\begin{aligned}&\text{極性ベクトル：}\quad l\to l\pm1,\\&\text{軸性ベクトル：}\quad l\to l.\end{aligned} \tag{30.8}$$

§ 31. 角運動量の合成

弱く相互作用している二つの部分からなる系を考えよう．相互作用を完全に無視すれば，各部分に対して角運動量の保存則が成り立ち，系の全角運動量 $\boldsymbol{L}$ は各部分の角運動量 $\boldsymbol{L}_1, \boldsymbol{L}_2$ の和とみなすことができる．その次の近似で弱い相互作用をとり入れると，$\boldsymbol{L}_1$ と $\boldsymbol{L}_2$ の保存則はもはや厳密には成り立たなくなるが，それらの自乗を定義する数 L_1 と L_2 は系の状態を近似的に記述するのに適した《良い》量子数のままである．直観的には，すなわち角運動量を古典的に考えれば，これは次のようにいうこともできる：この近似では $\boldsymbol{L}_1$ と $\boldsymbol{L}_2$ はその大きさを保存したまま $\boldsymbol{L}$ 方向の回りを回転する．

このような系の考察と関連して**角運動量の合成則**の問題が生ずる．L_1 と L_2 の値を与えたとき，L の可能な値はどうなるであろうか．角運動量成分の合成則ならば自明である：$\hat{L}_z=\hat{L}_{1z}+\hat{L}_{2z}$ から当然

$$M=M_1+M_2 \tag{31.1}$$

となる．

ところが角運動量の自乗の演算子に対してはこのような簡単な関係は存在しない．そこでその《合成則》を導くため次のように考えよう．

物理量の完全系として $L_1^2, L_2^2, L_{1z}, L_{2z}$ を選ぶと[1]，各状態は L_1, L_2, M_1, M_2 の値によって指定される．L_1 と L_2 を与えると M_1, M_2 はそれぞれ $(2L_1+1)$ および $(2L_2+1)$ 個の値をとる．したがって L_1, L_2 の同一値に対して全部で $(2L_1+1)(2L_2+1)$ 個の異なる状態が存在する．この記法による状態の波動関数を $\varphi_{L_1L_2M_1M_2}$ と書こう．

上述の4個の量のかわりに L_1^2, L_2^2, L^2, L_z を完全系として選ぶことができる．そうすれば各状態は L_1, L_2, L, M の値によって指定される（対応する波動関数は $\psi_{L_1L_2LM}$ のようにあらわす）．L_1 と L_2 を与えれば，もちろん前と同様に $(2L_1+1)(2L_2+1)$ 個の異なる状態があるはずである．すなわち L_1 と L_2 が与えられれば，数 L と M の対は $(2L_1+1)(2L_2+1)$ 個の対の値をとることができる．この値は次のような考察から決めることができる．

許される M_1 と M_2 の値を加え合わせると，それに対応する M の値がえられる．

M_1	M_2	M
L_1	L_2	L_1+L_2
L_1	L_2-1	L_1+L_2-1
L_1-1	L_2	
L_1-1	L_2-1	
L_1	L_2-2	L_1+L_2-2
L_1-2	L_2	
・・・	・・・	・・・

許される最も大きな M の値は $M=L_1+L_2$ であり，この値には一個の状態 φ（一対の M_1 と M_2 の値）が対応していることがわかる．それゆえ，状態 ψ の中で許される最大の M 値，したがって，最大の L の値は L_1+L_2 である．次に，$M=L_1+L_2-1$ をもつ二つの状態 φ がある．したがって，この値の M をもつ二つの状態 ψ の一つは $L=L_1+L_2$（と $M=L-1$）をもつ状態となり，もう一つは $L=L_1+L_2-1$（と $M=L$）をもつ状態となるはずである．M の値が

1）この他にも上述の4個と合わせて完全系となるような量がある．しかしこれら残りの量は以下の議論には響いてこないので，表式を簡単にするためこれについては何も触れず，かりにこの4個の量を完全系と呼ぶことにする．

L_1+L_2-2 の場合には，三つの異なる状態 φ がある．これは，$L=L_1+L_2$, $L=L_1+L_2-1$ という値とならんで，$L=L_1+L_2-2$ という値も可能であることを示している．

以上の考察を押し進めれば，M を一つだけ減らすと一定の M をもつ状態の数は一つだけ増えることになる．容易にわかるように，このことは M が $|L_1-L_2|$ なる値に達するまで続く．M がこれ以上減少しても，状態の数は増加せず，($L_2\leqq L_1$ ならば) $2L_2+1$ 個で止まってしまう．これは $|L_1-L_2|$ が L の最小の可能な値であることを意味している．

以上のことから L_1 と L_2 が与えられると，L は全部で $2L_2+1$ 個 ($L_2\leqq L_1$ とする) の異なる値

$$L=L_1+L_2,\quad L_1+L_2-1,\quad \cdots,\quad |L_1-L_2| \qquad (31.2)$$

をとると結論される．異なる M, L の値の対が $(2L_1+1)(2L_2+1)$ 個実際に得られることは容易に確かめられる．ここで (L を与えたときの $2L+1$ 個の異なる M の値に眼をつぶれば)，(31.2) の L の可能な値には状態がそれぞれ1個ずつ対応していることに注意することは重要である．

この結果はいわゆる**ベクトル模型**を用いて直観的に書きあらわすことができる．長さ L_1 と L_2 の2個のベクトル $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2$ を導入すれば，値 L は $\mathbf{L}_1$ と $\mathbf{L}_2$ のベクトル合成の結果得られるベクトル $\mathbf{L}$ の整数の長さをあらわしている．L の最大値 (L_1+L_2) は $\mathbf{L}_1$ と $\mathbf{L}_2$ が平行なときに得られ，最小値 ($|L_1-L_2|$) は反平行のときに得られる．

角運動量 L_1, L_2 および全角運動量 L が確定値をとる状態では，スカラー積 $\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2, \mathbf{L}\mathbf{L}_1, \mathbf{L}\mathbf{L}_2$ も確定値をとる．これらの値を求めるのは容易である．$\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2$ を計算するために $\hat{\mathbf{L}}=\hat{\mathbf{L}}_1+\hat{\mathbf{L}}_2$ と書く．あるいはその自乗をとって移項すると

$$2\hat{\mathbf{L}}_1\hat{\mathbf{L}}_2=\hat{\mathbf{L}}^2-\hat{\mathbf{L}}_1^2-\hat{\mathbf{L}}_2^2$$

となる．この式の右辺の演算子をその固有値で置きかえれば左辺の演算子の固有値が得られる：

$$\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2=\frac{1}{2}\{L(L+1)-L_1(L_1+1)-L_2(L_2+1)\}. \qquad (31.3)$$

同様にして：

$$\mathbf{L}\mathbf{L}_1=\frac{1}{2}\{L(L+1)+L_1(L_1+1)-L_2(L_2+1)\}. \qquad (31.4)$$

ここで**偶奇性の合成則**を求めておこう．すでに知っているように，二つの独立な部分からなる系の波動関数 Ψ は，それらの部分の波動関数 Ψ_1 と Ψ_2 の積であらわされる．それゆえもしもこれらの波動関数が二つとも同じ偶奇性をもっていれば（すなわち全座標の符号を変えたとき二つとも符号を変えるとか，あるいは二つとも符号を変えない場合），全系の波動関数は偶である．反対にもしも Ψ_1 と Ψ_2 が異なる偶奇性をもっていれば，波動関数 Ψ は奇である．この考え方は次の等式によって表わすことができる：

$$P=P_1P_2. \tag{31.5}$$

ここで，P は系全体の偶奇性，P_1 と P_2 はその部分の偶奇性である．

とくに中心対称場の中に置かれた粒子系を問題とする場合には（粒子間の相互作用も弱いとすれば），全系の状態の偶奇性は

$$P=(-1)^{l_1+l_2+\cdots} \tag{31.6}$$

である（(30.7) を参照）．ここで指数の中に入ってくるのは，一般には粒子の角運動量 l_i の代数和であって，《ベクトル和》ではないこと，すなわち系の角運動量 L でないことを強調しておこう．

もしも閉じた系が（内部に働く自己の力によって）いくつかの部分に分裂したとしても，その全角運動量と偶奇性は保存されなければならない．系の分裂がエネルギー的には可能であってもこの事情によって不可能になることがある．

たとえば角運動量 $L=0$ の偶状態にある原子を考えよう．これはエネルギー的には，自由電子および角運動量が同じく $L=0$ である奇状態のイオンに崩壊することが可能であるかもしれない．しかし容易にわかるように，現実にはこのような崩壊は起こりえない（すなわち**禁止**されている）．なぜなら角運動量の保存則によって自由電子もまたゼロの角運動量をもたなくてはならないので偶状態にある（$P=(-1)^0=+1$）．そうすると最初の原子の状態が偶状態であったのに，イオン＋自由電子の系の状態は奇状態になってしまうからである．

第5章　中心対称場の中の運動

§ 32. 中心対称場の中の運動

互いに相互作用している2粒子の運動に関する問題は，古典力学でなされるのと同様に量子力学でも1粒子の問題に還元することができる．法則 $U(r)$（r は2粒子間の距離）に従って相互作用している（質量が m_1, m_2 の）2粒子のハミルトニアンは次の形をとる：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\triangle_1-\frac{\hbar^2}{2m_2}\triangle_2+U(r). \tag{32.1}$$

ここで $\triangle_1, \triangle_2$ は，粒子の座標についてのラプラス演算子である．粒子の動径ベクトル $\boldsymbol{r}_1$ および $\boldsymbol{r}_2$ のかわりに新しい変数 $\boldsymbol{R}$ および $\boldsymbol{r}$ を導入する：

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1, \qquad \boldsymbol{R}=\frac{m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1+m_2}. \tag{32.2}$$

$\boldsymbol{r}$ は相対距離のベクトル，$\boldsymbol{R}$ は粒子の慣性中心の動径ベクトルである．簡単な計算により次の結果を得る：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\triangle_R-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+U(r) \tag{32.3}$$

（$\triangle_R$ および $\triangle$ はそれぞれベクトル $\boldsymbol{R}$ および $\boldsymbol{r}$ の成分に関するラプラス演算子；m_1+m_2 は系の全質量，$m=m_1m_2/(m_1+m_2)$ はいわゆる換算質量である）．こうしてハミルトニアンは二つの独立な部分の和に分解される．これに対応して $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ を積 $\varphi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r})$ の形に求めることができる．ここで関数 $\varphi(\boldsymbol{R})$ は慣性中心の運動（質量 m_1+m_2 をもつ粒子の自由な運動）を記述し，$\psi(\boldsymbol{r})$ は2粒子の相対運動（中心対称場 $U=U(r)$ の中の質量 m の粒子の運動）を記述している．

中心対称場の中の粒子の運動に対するシュレーディンガー方程式は次の形をとる：

$$\triangle\psi+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\psi=0. \qquad (32.4)$$

球座標におけるラプラス演算子のよく知られた式を用いて，この方程式を次の形に書く：

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]$$
$$+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\psi=0. \qquad (32.5)$$

もしもここで角運動量の自乗の演算子（26.16）を導入すると，次式を得る[1]：

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{\hat{l}^2}{r^2}\psi\right]+U(r)\psi=E\psi. \qquad (32.6)$$

中心対称場の中の運動では角運動量が保存される．角運動量 l およびその投影 m が確定値をもつ定常状態を研究しよう．l と m が与えられることにより，波動関数の角度依存性が決定される．それに応じて方程式（32.6）の解は次の形に求められる：

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \qquad (32.7)$$

ここで $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ は球関数である．ところで $\hat{l}^2Y_{lm}=l(l+1)Y_{lm}$ であるから《動径関数》$R(r)$ に対して方程式

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]R=0 \qquad (32.8)$$

が得られる．この方程式は $l_z=m$ の値をまったく含まない．このことはすでにわれわれの知っている角運動量の方向に関する準位の $(2l+1)$ 重の縮退に対応している．

波動関数の動径部分の研究にとりかかろう．まず

$$R(r)=\frac{\chi(r)}{r} \qquad (32.9)$$

と置換すると方程式（32.8）は次の形になる：

1）もしも運動量の動径成分 p_r の演算子を

$$\hat{p}_r\psi=-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi$$

という形で導入すると，ハミルトニアンは次の形に書くことができる：

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_r^2+\frac{\hbar^2\hat{l}^2}{r^2}\right)+U(r).$$

これは球座標における古典的なハミルトン関数と同じ形である．

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi=0. \tag{32.10}$$

もしもポテンシャル・エネルギー $U(r)$ がいたるところで有限であれば，波動関数 ψ，したがってその動径部分 $R(r)$ もまた座標原点を含めた全空間で有限でなければならない．これから $\chi(r)$ は $r=0$ でゼロとなるべきことが出てくる：

$$\chi(0)=0. \tag{32.11}$$

実際にはこの条件は $r\to 0$ で無限大となる場に対しても成り立つ（§35 参照）．

方程式（32.10）はポテンシャル・エネルギー

$$U_l(r)=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} \tag{32.12}$$

の場の中の1次元運動に対するシュレーディンガー方程式と同じ形である．このポテンシャル・エネルギーはエネルギー $U(r)$ と遠心エネルギーと呼ばれる項

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}=\frac{\hbar^2 \boldsymbol{l}^2}{2mr^2}$$

との和である．こうして中心対称場の中の運動の問題は，片側を限られた（$r=0$ における境界条件）半無限領域の1次元運動の問題に帰着される．積分

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr=\int_0^\infty |\chi|^2 dr$$

によって決定される関数 χ に対する規格化条件もまた《一次元的性格》をもっている．

半無限領域内の1次元運動ではエネルギー準位は縮退しない（§21）．したがってエネルギーの値を与えると，方程式（32.10）の解つまり波動関数の動径部分は完全に決まるといってよい．波動関数の角度部分が l および m の値によって完全に定められることを考慮すると，中心対称場の中の運動では波動関数は E, l, m の値によって完全に決定されると結論できる．いいかえるとエネルギー，角運動量の自乗および角運動量の投影は一括してこのような運動に対する物理量の完全な組となっている．

中心対称場の中の運動が1次元運動の問題に帰着されることにより振動定理（§21参照）が適用できる．与えられた l のもとで（離散スペクトルの）エネル

ギー固有値を大きさの順序に並べそれらに番号 n_r をつける；このとき最低準位には番号 $n_r=0$ をつける．すると n_r は r の有限な値での波動関数の動径部分の節の数を与える（点 $r=0$ は勘定に入れない）．数 n_r は**動径量子数**と呼ばれる．中心対称場の中の運動では数 l は**方位量子数**，数 m は**磁気量子数**と呼ばれることがある．

粒子の角運動量 l がいろいろな値をとる状態をあらわすために，広く用いられている慣用記号が存在する；その状態は次のような対応関係をもつローマ字のアルファベットによってあらわされる：

$$\begin{array}{ccccccccc} l= & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \cdots \\ & s & p & d & f & g & h & i & k & \cdots . \end{array} \tag{32.13}$$

中心対称場の中を運動している粒子の基底状態は常に s 状態である；なぜなら基底状態の波動関数は節をもってはならないのに，$l\neq 0$ では波動関数の角度部分はかならず節をもつからである．したがって，与えられた l に対して許される最低のエネルギー固有値は l の増大とともに大きくなるといえる．このことは，角運動量が存在するとハミルトニアンには正の定符号をもつ項 $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$ が付加され，これが l の増大とともに大きくなるということからも導かれる．

原点近傍の動径関数の形を決めよう．そこでは

$$\lim_{r\to 0} U(r)r^2=0 \tag{32.14}$$

であると仮定する．$R(r)$ を r に関するベキ級数の形に求め，r の小さいところで展開の第1項のみを残すことにする．いいかえると $R(r)$ を $R=\text{const}\cdot r^s$ の形に求める．式 (32.8) に r^2 を掛けさらに $r\to 0$ の極限をとって得られる方程式

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-l(l+1)R=0$$

に，この式を代入すれば

$$s(s+1)=l(l+1)$$

を得る．これから

$$s=l \quad \text{または} \quad s=-(l+1)$$

となる．$s=-(l+1)$ なる解は必要条件を満足していない：$r=0$ でこの解は無

限大になる（$l \geqq 0$ であることを想起せよ）．したがって $s=l$ なる解が残る．すなわち原点付近では与えられた l の状態の波動関数は r^l に比例する：

$$R_l \cong \text{const}\cdot r^l. \tag{32.15}$$

中心から距離 r および $r+dr$ の間に粒子が見いだされる確率は量 $r^2|R|^2$ で与えられる．したがってこれは $r^{2(l+1)}$ に比例する．これは l の値が大きければ大きいほど，より急激に座標原点でゼロになることがわかる．

§ 33. 球 面 波

平面波

$$\psi_p = \text{const}\cdot e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$$

は，自由な粒子が一定の運動量 $\mathbf{p}$（およびエネルギー $E=p^2/2m$）をもつ定常状態を記述している．この節ではエネルギーの他に角運動量の確定した大きさと投影値をもつ自由粒子の定常状態を考察しよう．エネルギーのかわりに波動ベクトル

$$k=\frac{p}{\hbar}=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{33.1}$$

を導入すると便利である．

角運動量 l およびその投影 m をもつ状態の波動関数は次の形をとる：

$$\psi_{klm}=R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{33.2}$$

ここで動径関数は次の方程式で決められる：

$$R_{kl}''+\frac{2}{r}R_{kl}'+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{kl}=0 \tag{33.3}$$

[これは（32.8）で $U(r)\equiv 0$ と置いたものである]．（k に関して）連続スペクトルをもつ波動関数 ψ_{klm} は規格化の条件と相互の直交性の条件を満足する：

$$\int \psi^*_{k'l'm'}\psi_{klm}dV=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta\left(\frac{k'-k}{2\pi}\right).$$

異なる l, l' および m, m' に対する相互の直交性は波動関数の角度部分により保証されている．動径関数は条件

$$\int_0^\infty r^2 R_{k'l}R_{kl}dr=\delta\left(\frac{k'-k}{2\pi}\right)=2\pi\delta(k'-k) \tag{33.4}$$

によって規格化されなければならない．もしも波動関数を《$k/2\pi$・目盛》では

なく《エネルギー・目盛》で規格化するならば，つまり条件

$$\int_0^\infty r^2 R_{E'l} R_{El} dr = \delta(E'-E)$$

で規格化すると，一般公式（5.14）によって

$$R_{El} = R_{kl}\left(\frac{1}{2\pi}\frac{dk}{dE}\right)^{1/2} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\pi k}}R_{kl} \tag{33.5}$$

を得る．

$l=0$ のとき方程式（33.3）は

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_{k0}) + k^2 rR_{k0} = 0$$

と書ける．$r=0$ で有限でしかも条件（33.4）により規格化されたこの方程式の解は［(21.9) と比較せよ］

$$R_{k0} = 2\frac{\sin kr}{r} \tag{33.6}$$

である．

$l\neq0$ の場合に方程式（33.3）を解くためには次の置換を行なう：

$$R_{kl} = r^l \chi_{kl}. \tag{33.7}$$

すると χ_{kl} に対しては方程式

$$\chi_{kl}'' + \frac{2(l+1)}{r}\chi_{kl}' + k^2\chi_{kl} = 0$$

を得る．この方程式を r に関して微分すると

$$\chi_{kl}''' + \frac{2(l+1)}{r}\chi_{kl}'' + \left[k^2 - \frac{2(l+1)}{r^2}\right]\chi_{kl}' = 0$$

が得られる．$\chi_{kl}' = r\chi_{k,l+1}$ なる置換によりこの式は次の形になる：

$$\chi_{k,l+1}'' + \frac{2(l+2)}{r}\chi_{k,l+1}' + k^2\chi_{k,l+1} = 0.$$

これはまさに関数 $\chi_{k,l+1}$ が満たすべき方程式に他ならない．したがって関数 χ_{kl} は関係式

$$\chi_{k,l+1} = \frac{1}{r}\chi_{kl}' \tag{33.8}$$

により順次に相互に結ばれている．それゆえ

$$\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l \chi_{k0}$$

となる．ここで $\chi_{k0}=R_{k0}$ は式 (33.6) によって定義されている（もちろんこの式にはさらに任意の定数を掛けてもよい）．

こうして結局粒子の自由運動の動径関数に対する次のような表式が得られる：

$$R_{kl}=(-1)^l\cdot 2\frac{r^l}{k^l}\left(\frac{d}{rdr}\right)^l\frac{\sin kr}{r} \tag{33.9}$$

（因子 k^{-l} は規格化のために導入した．これについては以下を参照；因子 $(-1)^l$ は便利のため導入した）．関数 (33.9) は半整数次のベッセル関数を用いて次の形にあらわすことができる：

$$R_{kl}=\sqrt{\frac{2\pi k}{r}}J_{l+1/2}(kr)=2kj_l(kr). \tag{33.10}$$

ここで導入された関数

$$j_l(x)=\sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{l+1/2}(x) \tag{33.11}$$

はベッセルの球関数と呼ばれる[1]．

距離の大きいところでの動径関数 (33.9) の漸近形を得るためには，$r\to\infty$ のとき r とともにもっともゆっくり減少する項は正弦関数を l 回微分して得られることに注意する．$-d/dr$ の微分を行うごとに，正弦関数はその引数の中に $-\pi/2$ を加えることになるので，次のような漸近形を得る：

$$R_{kl}\approx\frac{2}{r}\sin\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right) \tag{33.12}$$

§21 で説明したように，関数 R_{kl} の規格化はその漸近形を用いて行なうことができる．漸近式 (33.12) を規格化された関数 R_{k0} (33.6) と比較すれば，関数 R_{kl} は (33.9) で選んだ係数をもてば実際にちょうどうまく規格化されていることがわかる．

座標原点の近傍では（すなわち r が小さいときには），$\sin kr$ を級数展開し，微分ののち r について最低次の項だけを残せば次式を得る[2]：

---

1) 関数 j_l のはじめの数個は次のとおりである：

$$j_0=\frac{\sin x}{x},\quad j_1=\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x},\quad j_2=\left(\frac{3}{x^3}-\frac{1}{x}\right)\sin x-\frac{3\cos x}{x^2}.$$

文献によっては (33.11) に x を乗じたものを関数 j_l の定義としている場合もある．

2) 記号 !! は与えられた数およびそれと同じ偶奇性をもつそれより小さいすべての整数の積をあらわしている．

$$\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l\frac{\sin kr}{r}\approx\left(\frac{1}{r}\frac{r}{dr}\right)^l(-1)^l\frac{(kr)^{2l+1}}{r(2l+1)!}=\frac{(-1)^lk^{2l+1}}{(2l+1)!!}.$$

したがって座標原点付近では関数 R_{kl} は次の形をもつ：

$$R_{kl}\approx\frac{2k^{l+1}}{(2l+1)!!}r^l. \tag{33.13}$$

これは一般的な結果（32.15）と一致している．

（散乱理論における）ある問題では，中心から湧き出る粒子束あるいは反対に中心に向かう粒子束に対応して，通常の有限性の条件を満たさない波動関数を考察することが必要になる．角運動量が $l=0$ のこのような粒子束を記述する波動関数を得るには，定在球面波（33.6）のかわりに次のような発散球面波（R_{k0}^+）または収束球面波（R_{k0}^-）の形の解をとればよい：

$$R_{k0}^{\pm}=\frac{A}{r}e^{\pm ikr}. \tag{33.14}$$

角運動量 l がゼロでない一般の場合には，方程式（33.3）の次の形の解を得る：

$$R_{kl}^{\pm}=(-1)^lA\frac{r^l}{k^l}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l\frac{e^{\pm ikr}}{r}. \tag{33.15}$$

これらの関数はハンケル関数を用いて

$$R_{kl}^{\pm}=\pm iA\sqrt{\frac{k\pi}{2r}}H_{l+1/2}^{(1,2)}(kr) \tag{33.16}$$

とあらわすことができる（この式の + および − の符号には第1種および第2種のハンケル関数がそれぞれ対応している）．関数（33.15）の漸近展開は

$$R_{kl}^{\pm}\approx\frac{A}{r}\exp\left[\pm i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)\right] \tag{33.17}$$

である．また座標原点近傍ではこれは次の形をもつ：

$$R_{kl}^{\pm}\approx A\frac{(2l-1)!!}{k^l}r^{-l-1}. \tag{33.18}$$

単位時間当たり粒子1個の放出（または吸収）に対応するようにこれらの関数を規格化しよう．そのために遠方の狭い範囲内で球面波を平面波とみなすことができて，その中の流れの密度は $j=v\psi\psi^*$ に等しいことに注目する；ここで $v=k\hbar/m$ は粒子の速度である．規格化は条件 $\oint jdf=1$ によって決定される；ここで積分は大きい半径 r の球面上で行なわれる；つまり do を立体角要

素として$\int jr^2 do=1$となる．したがって角度関数の規格化が前と同じであるとすると，動径関数につく係数Aは次のように置かなければならない：

$$A=\frac{1}{\sqrt{v}}=\sqrt{\frac{m}{k\hbar}}. \tag{33.19}$$

式(33.12)と類似の漸近式は，自由運動の波動関数の動径部分に対して成り立つばかりでなく，距離とともに十分急速に減少する任意の場の中の（正のエネルギーをもつ）運動に対しても成り立つ[1]．距離が大きければシュレーディンガー方程式の中でこのような場も遠心エネルギーも無視することができて，次の近似的な方程式が残る：

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(rR_{kl})}{dr^2}+k^2R_{kl}=0.$$

この方程式の一般解は

$$R_{kl}\approx 2\frac{\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)}{r} \tag{33.20}$$

である．ここでδ_lは定数（**位相のずれ**）であり，共通因子は《$k/2\pi$目盛》で波動関数を規格化するように選んだ[2]．定数位相δ_lは（$r\to 0$でR_{kl}が有限であるという）境界条件で決定される；その場合には厳密なシュレーディンガー方程式が解かれる必要があり，一般的な形で計算することはできない．位相δ_lはもちろんlおよびkの関数であり，連続スペクトルの固有関数の重要な特性である．

問　　題

1. 球対称の直角型ポテンシャル井戸：

$r<a$ では $U(r)=-U_0$,　　$r>a$ では $U(r)=0$

の中を角運動量$l=0$で運動する粒子の運動に対するエネルギー準位を求めよ．

解　$l=0$であれば波動関数はrのみに依存する．井戸の中ではシュレーディンガー方程式は次の形をもつ：

---

1) § 124で示されるように，場は$1/r$よりも速く減少しなければならない．

2) 正弦関数の引数の中に項$-l\pi/2$を加えたのは，場が存在しないときに$\delta_l=0$となるようにするためである．波動関数の符号は重要な意味をもたないので，位相δ_lは（$2\pi n$ではなく）$n\pi$を除いて定めてよい：それゆえその値はいつも0とπのあいだにもってくることができる．

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\psi)+k^2\psi=0, \qquad k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-|E|)}.$$

$r=0$ で有限な解は

$$\psi=A\frac{\sin kr}{r}$$

である．$r>a$ では次の方程式を得る：

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\psi)-\kappa^2\psi=0, \qquad \kappa=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}.$$

無限遠でゼロとなる解は

$$\psi=A'\frac{e^{-\kappa r}}{r}$$

である．$r=a$ における $r\psi$ の対数微分の連続条件により

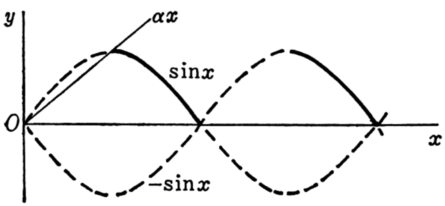
$$k\cot ka=-\kappa=-\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}-k^2}, \tag{1}$$

または

$$\sin ka=\pm\sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2U_0}}ka \tag{2}$$

を得る． 求めるエネルギー準位はこの方程式から間接的な形で決定される (式 (1)からわかるように， $\cot ka<0$ であるように方程式の根をとらなければならない)． これらの準位 ($l=0$ なる準位) の最初のものは同時にあらゆるエネルギー準位のうちで最も深い；つまり粒子の基底状態に対応している．

ポテンシャル井戸の深さ U_0 が十分に浅いときには，負のエネルギー準位は一般に存在しない．つまり粒子を井戸に《閉じこめる》ことはできない．このことは方程式(2)より次のような作図を用いれば明らかである．方程式 $\pm\sin x=\alpha x$ の根は，直線 $y=\alpha x$ と曲線 $y=\pm\sin x$ の交点であらわされる．このとき $\cot x<0$ になるような交点のみを考えなければならない．曲線 $y=\pm\sin x$ のこれに対応する部分を第9図に実線で示した．十分に大きい α (十分に小さい U_0) に対してはこのような交点は一般に存在しないことがわかる． 最初のこのような点は直線 $y=\alpha x$ が第9図に示す位置に来たときに， すなわち $\alpha=2/\pi$ のときにあらわれる： これは $x=\pi/2$ のところに見いだされる．$\alpha=\hbar/\sqrt{2ma^2U_0}$, $x=ka$ と置くと，最初の負の準位があらわれる井戸の最小の深さはこれから次式で与えられる：



第 9 図

$$U_{0\,\min}=\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}. \tag{3}$$

この値は井戸の半径 a が小さいほど大きくなる．最初の準位 E_1 の位置はそれがあらわ

れたばかりのときは $ka=\pi/2$ によって定められ，当然期待されるように $E_1=0$ である．井戸の深さがさらに増大するに従って基底準位 E_1 も下がっていく．差 $\Delta=U_0/U_{0\,\min}-1$ が小さいとき，E_1 の下がり方は法則

$$-E_1=\frac{\pi^2}{16}U_{0\,\min}\Delta^2 \tag{4}$$

に従う．

2. 非常に深い ($U_0\gg\hbar^2/ma^2$) 球対称ポテンシャル井戸の中でいろいろな値の角運動量 l をもつエネルギー準位の配列順序を求めよ (W. Elsasser, 1933).

解 $U_0\to\infty$ のとき，井戸の境界条件より ψ は境界上でゼロとなることが要求される (§ 22 参照)．井戸の中の動径波動関数を (33.10) の形に書くと

$$J_{l+1/2}(ka)=0$$

なる方程式を得る．この根は l のいろいろな値に対して井戸の底からはかった準位の位置を決定する ($U_0-|E|=\hbar^2k^2/2m$)．基底状態から始まるその配列順序は次のとおりである：

$$1s,\ 1p,\ 1d,\ 2s,\ 1f,\ 2p,\ 1g,\ 2d,\ 1h,\ 3s,\ 2f,\ \cdots.$$

ローマ字の前の数字は同じ l をもつ準位に，高くなる順の番号をつけたものである[1]．

3. 井戸の深さ U_0 が増すとともに，l のいろいろな値をもつ準位があらわれる順序を求めよ．

解 新しい準位がはじめてあらわれる瞬間にはエネルギーは $E=0$ となる．これに対応する波動関数で井戸の外において $r\to\infty$ のときゼロとなるものは $R_l=\text{const}\cdot r^{-(l+1)}$ である [$k=0$ と置いた方程式 (33.3) の解]．井戸の境界上での R_l と R_l' の連続性から，とくに導関数 $(r^{l+1}R_l)'$ の連続性が導かれ，これからこの場合には井戸の中の波動関数に対して次のような条件が得られる：

$$r=a \quad において，\quad (r^{l+1}R_l)'=0.$$

これは関数 R_{l-1} がゼロとなる条件と同等であり[2]．(33.10) により方程式

$$J_{l-1/2}\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2mU_0}\right)=0$$

を得る；$l=0$ のときは関数 $J_{l-1/2}$ を cos に置きかえなければならない．これから U_0 が増すとともに新しい準位があらわれる順序が得られる：

$$1s,\ 1p,\ 1d,\ 2s,\ 1f,\ 2p,\ 1g,\ 2d,\ 3s,\ 1h,\ 2f,\ \cdots.$$

---

1) このような記号は核の中の粒子の準位に対して用いられている (§ 118 参照).

2) (33.7) および (33.8) により $(r^{-l}R_l)'\sim r^{-l}R_{l+1}$ を得る．方程式 (33.3) は l を $-l-1$ に置きかえても変わらないので

$$(r^{l+1}R_{-l-1})'\sim r^{l+1}R_{-l}$$

とも書ける．最後に関数 R_{-l} と R_{l-1} は同一の方程式を満足するので，結局本文で引用した

$$(r^{l+1}R_l)'\sim r^{l+1}R_{l-1}$$

なる式が得られる．

深い井戸の中の準位の配列順序との差は，比較的高い準位になってはじめてあらわれることに注意しよう．

4.　3次元振動子 $\left(U=\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right.$ の場の中の粒子$\left.\right)$ のエネルギー準位，その縮退度およびそれに対応する定常状態における軌道角運動量の可能な値を求めよ．

解　$U=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)$ の場の中の粒子に対するシュレーディンガー方程式は変数分離ができて，線形振動子型の三つの方程式に分解される．したがってエネルギー準位は

$$E=\hbar\omega\left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right)\equiv\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)$$

となる．

n 番目の準位の縮退度は，n を（ゼロを含む）三つの正の整数の和に分解する方法の数に等しい[1]．これは

$$\frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

である．

定常状態の波動関数は

$$\psi_{n_1n_2n_3}=\mathrm{const}\cdot\exp\left(-\alpha^2r^2/2\right)H_{n_1}(\alpha x)H_{n_2}(\alpha y)H_{n_3}(\alpha z) \qquad (1)$$

である．ここで $\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$ である（m は粒子の質量）．座標の符号を変えると，多項式 H_n は $(-1)^n$ 倍される．したがって関数 (1) の偶奇性は $(-1)^{n_1+n_2+n_3}=(-1)^n$ である．和 $n_1+n_2+n_3=n$ が一定のこれらの関数の線形結合をとり，関数

$$\psi_{nlm}=\mathrm{const}\cdot r^l\exp\left(-\frac{\alpha^2r^2}{2}\right)Y_{lm}(\theta,\varphi)F\left(-\frac{n-l}{2},\ l+\frac{3}{2},\ \alpha^2r^2\right) \qquad (2)$$

をつくることができる．ここで F は合流型超幾何関数である．この式は方程式(32.8)の直接の解として得られる．また(2)の中で $|m|=0,1,\cdots,l$ であり，偶数の n に対して l は $0,2,\cdots,n$ なる値をとり，奇数の n に対しては $1,3,\cdots,n$ なる値をとる；このことは関数(1)の偶奇性 $(-1)^n$ と関数 (2) の偶奇性 $(-1)^l$ を比較して同一でなければならないことから明らかである．これにより考えているエネルギー準位に対応する軌道角運動量の可能な値が決定される．

したがって3次元振動子の準位の順序は（問題2,3と同じ記号を用いて）次のようになる：

$$(1s),\ (1p),\ (1d,2s),\ (1f,2p),\ (1g,2d,3s),\cdots.$$

ここで括弧に含まれるのは互いに縮退した状態である[2]．

---

1)　いいかえるとこれは n 個の同じ球を三つの箱にわける方法の数である．

2)　異なる角運動量 l をもつ互いに縮退した準位に注意せよ．この点に関して148頁の脚注を見よ．

§ 34. 平面波の展開

確定した運動量 $p=k\hbar$ をもって z 軸の正の方向へ運動している自由粒子を考察しよう．このような粒子の波動関数は次の形をもつ：

$$\psi=\text{const}\cdot e^{ikz}.$$

この関数を確定した角運動量をもつ自由運動の波動関数 ψ_{klm} で展開しよう．考察している状態ではエネルギーは確定値 $E=k^2\hbar^2/2m$ をもっているので，求める展開式にはこの k の関数だけが入ることは明らかである．さらに関数 e^{ikz} は z 軸の回りの軸対称性をもっているので，その展開式には角度 φ に依存しない関数，つまり $m=0$ の関数のみが入る．したがって次のようにならなければならない：

$$e^{ikz}=\sum_{l=0}^{\infty} a_l\psi_{kl0}=\sum_{l=0}^{\infty} a_lR_{kl}Y_{l0}.$$

ここで a_l は定数である．関数 Y_{l0}, R_{kl} に式 (28.8), (33.9) を代入すると次式を得る：

$$e^{ikz}=\sum_{l=0}^{\infty} C_lP_l(\cos\theta)\left(\frac{r}{k}\right)^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l\frac{\sin kr}{kr}\qquad (z=r\cos\theta).$$

ここで C_l はまた別の定数である．これらの定数は，等式の両辺の r についてのベキ展開式で $(r\cos\theta)^n$ の係数を比較するとうまく決定できる．等式の右辺では，このような項は第 n 番目の被加式だけに存在する．なんとなれば $l>n$ のときは動径関数の展開式は r のもっと高次のベキから始まり，また $l<n$ のときは，多項式 $P_l(\cos\theta)$ は $\cos\theta$ のもっと低次のベキだけを含むからである．$P_l(\cos\theta)$ の中の $\cos^l\theta$ を含む項の係数は $(2l)!/2^l(l!)^2$ である［公式 (c.1) 参照］．また式 (33.13) を用いれば等式の右辺のわれわれに興味のある展開項は

$$(-1)^lC_l\frac{(2l)!(kr\cos\theta)^l}{2^l(l!)^2 1\cdot 3\cdots(2l+1)}$$

と求められる．等式の左辺の（$e^{ikr\cos\theta}$ の展開式の中の）対応する項は

$$\frac{(ikr\cos\theta)^l}{l!}$$

である．

この二つの量を等しいと置けば $C_l=(-i)^l(2l+1)$ を得る．こうして結局求めるべき展開式が得られる：

$$e^{ikz}=\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\left(\frac{r}{k}\right)^l\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^l\frac{\sin kr}{kr}.\qquad (34.1)$$

この式は大きい距離のところで次の漸近形をとる：

$$e^{ikz}\approx\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right). \tag{34.2}$$

(34.1) において z 軸は平面波の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向に選んである．この展開式は，座標軸の特定の選び方を仮定しないで，もっと一般的な形に書くことができる．このためには，多項式 $P_l(\cos\theta)$ を $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{r}$ の方向（両者の間の角度は θ である）の球関数であらわすために，球関数の加法定理を用いなければならない [(c.11) を見よ]．すると次式を得る：

$$e^{i\boldsymbol{kr}}=4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}i^{l}j_{l}(kr)Y_{lm}^{*}\left(\frac{\boldsymbol{k}}{k}\right)Y_{lm}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) \tag{34.3}$$

((33.11) で定義された）関数 $j_l(kr)$ は積 kr のみに依存する，このためベクトル $\boldsymbol{k}$ および $\boldsymbol{r}$ に関するこの公式の対称性は明らかである（二つの球関数のどちらに複素共役の記号があっても同じである）．

波動関数 e^{ikz} を規格化して確率の流れの密度が1であるようにしよう；つまり単位断面積を通して単位時間に1個の粒子が通過する（z 軸に平行な）粒子束に対応するように規格化する．そのような関数は

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{v}}e^{ikz}=\sqrt{\frac{m}{k\hbar}}e^{ikz} \tag{34.4}$$

である（v は粒子の速度；(19.7) を見よ）．等式 (34.1) の両辺に $\sqrt{m/k\hbar}$ を掛け，その右辺に規格化された関数 $\psi_{klm}^{\pm}=R_{kl}^{\pm}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ を導入すると次式を得る*)：

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{\pi(2l+1)}\frac{1}{ik}(\psi_{kl0}^{+}-\psi_{kl0}^{-}).$$

この展開式の ψ_{kl0}^{-}（または ψ_{kl0}^{+}）の係数の絶対値の自乗は，一般規則に従って，中心へ向かう（または中心から発散する）流れの中の粒子が（座標原点の回りに）角運動量 l をもつ確率を与える．波動関数 $e^{ikz}/\sqrt{v}$ は密度が1であるような粒子束に対応しているので，この《確率》は長さの自乗の次元をもっている；この《確率》は入射粒子の角運動量が l に等しい場合にそれが当たる (x,y 面内の)《標的面積》の大きさであると直観的に解釈できる．この量を σ_l

---

*) (33.15) の定義参照（訳注）

であらわすと次式になる：

$$\sigma_l=\frac{\pi}{k^2}(2l+1). \tag{34.5}$$

l の値が大きいとき l の値が Δl の範囲にある標的面積の和は（$1\ll\Delta l\ll l$ とする）

$$\sum_{\Delta l}\sigma_l\approx\frac{\pi}{k^2}2l\Delta l=2\pi\frac{l\hbar^2}{p^2}\Delta l$$

である．角運動量に対する古典的な表式 $\hbar l=\rho p$（ここで ρ はいわゆる衝突径数）を代入すると，この式は

$$2\pi\rho\Delta\rho$$

となり，これは古典的な表式と一致する．このことは決して偶然ではない：あとで見るように l の値が大きいときには運動は準古典的になる（§49）.

§ 35. 中心への粒子の落下

量子力学的運動の若干の特質を解明するためには，ある点（原点とする）で $U(r)\approx-\beta/r^2$ $(\beta>0)$ なる法則に従って無限大となるポテンシャル・エネルギーの場の中の粒子の運動のような，直接の物理的意味をもたない事例を研究するのも有益である．この場合原点から遠く離れた場の形には興味がない．すでに §18 において見たように，これは通常の定常状態が存在する場合と原点へ向かって粒子の《落下》が起こる場合とのちょうど中間の場合に当たる．

このとき原点の近くではシュレーディンガー方程式は

$$R''+\frac{2}{r}R'+\frac{\gamma}{r^2}R=0 \tag{35.1}$$

となる［$R(r)$ は波動関数の動径部分］．ここで定数

$$\gamma=\frac{2m\beta}{\hbar^2}-l(l+1) \tag{35.2}$$

を導入し，$1/r$ について低次の項はすべて省いた；たとえばエネルギーの値 E は有限であると仮定しているので，方程式の中のこれに対応する項も省いた．

R を $R\sim r^s$ の形に求めると s に対して 2 次方程式

$$s(s+1)+\gamma=0$$

が得られる．この根は二つあって

$$s_1=-\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}-\gamma},\qquad s_2=-\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{1}{4}-\gamma} \tag{35.3}$$

である．

研究をさらに進めるためには次のようにすると便利である．座標原点の回りに半径 r_0 の小さい領域をとり出して，この領域内では関数 $-\gamma/r^2$ を定数の量 $-\gamma/r_0^2$ に置きかえる．この《切断された》場の中の波動関数を決定し，しかるのちに $r_0\to 0$ の極限移行で得られるものを考える．

まず $\gamma<1/4$ と仮定しよう．すると s_1 および s_2 は負の実数であり，しかも $s_1>s_2$ である．$r>r_0$ のときはシュレーディンガー方程式の一般解は次の形をとる（いつも r の小さいところを問題とする）：

$$R=Ar^{s_1}+Br^{s_2} \tag{35.4}$$

（A, B は定数）．$r<r_0$ のときは方程式

$$R''+\frac{2}{r}R'+\frac{\gamma}{r_0^2}R=0$$

の座標原点で有限な解は次の形をもつ：

$$R=C\frac{\sin kr}{r}, \qquad k=\frac{\sqrt{\gamma}}{r_0}. \tag{35.5}$$

$r=r_0$ において関数 R およびその導関数 R' は連続でなければならない．この条件のうち一つは rR の対数微分の連続条件の形に書くと便利である．この結果方程式

$$\frac{A(s_1+1)r_0^{s_1}+B(s_2+1)r_0^{s_2}}{Ar_0^{s_1+1}+Br_0^{s_2+1}}=k\cot kr_0,$$

または

$$\frac{A(s_1+1)r_0^{s_1}+B(s_2+1)r_0^{s_2}}{Ar_0^{s_1}+Br_0^{s_2}}=\sqrt{\gamma}\cot\sqrt{\gamma}.$$

が得られる．この方程式は，比 B/A について解くと次式を与える：

$$\frac{B}{A}=\mathrm{const}\cdot r_0^{s_1-s_2}. \tag{35.6}$$

さて $r_0\to 0$ の極限へ移行すると，$B/A\to 0$ となることがわかる（$s_1>s_2$ であることを思い起こせ）．したがって，シュレーディンガー方程式 (35.1) の原点で発散する二つの解のうち，よりおそく無限大に発散する次の解を選ばなければならない：

$$R=A\frac{1}{r^{|s_1|}}. \tag{35.7}$$

つぎに $\gamma>1/4$ と仮定しよう．すると s_1 および s_2 は複素数となる：

$$s_1=-\frac{1}{2}+i\sqrt{\gamma-\frac{1}{4}}, \qquad s_2=s_1^*.$$

前述の議論をもう一度くり返すと，ふたたび等式 (35.6) に達する．これに s_1 および s_2 の値を代入すると

$$\frac{B}{A}=\text{const}\cdot r_0^{\,i\sqrt{4\gamma-1}} \tag{35.8}$$

となる．$r_0\to0$ のときこの式はいかなる定まった極限へも収束せず，したがって $r_0\to0$ の極限へ直接移行することは不可能である．(35.8) を考慮すると実の解の一般形は次のように書ける：

$$R=\text{const}\cdot\frac{1}{\sqrt{r}}\cos\left(\sqrt{\gamma-\frac{1}{4}}\ln\frac{r}{r_0}+\text{const}\right). \tag{35.9}$$

この関数のもつゼロ点の数は r_0 が減少するとともに無限に増加する．式 (35.9) は任意の有限なエネルギー値 E をもつ粒子の波動関数に対して（十分小さい r で）成り立つ．一方基底状態の波動関数はけっしてゼロ点をもたないので，いま考察している場の中の粒子の《基底状態》はエネルギー $E=-\infty$ に対応していると結論できる．しかし離散スペクトルのあらゆる状態では，粒子は主として $E>U$ なる空間領域に存在する．したがって $E\to-\infty$ となれば，粒子は原点の回りの無限小の領域に入る．すなわち中心への粒子の《落下》が起こる．

中心への粒子の落下が可能になる《臨界》場 U_{cr} には，$\gamma=1/4$ の値が対応している．$-1/r^2$ につく係数の最小値は $l=0$ のときに得られる；すなわち

$$U_{cr}=-\frac{\hbar^2}{8mr^2} \tag{35.10}$$

である．

（s_1 に対する）式 (35.3) から明らかなように，シュレーディンガー方程式の（$U\sim1/r^2$ となる点の近傍で）許される解は $r\to0$ のとき $1/\sqrt{r}$ よりおそく発散する．もしも $r\to0$ のとき場が $1/r^2$ よりもゆっくり無限大となるならば，座標原点の近傍ではシュレーディンガー方程式の中で $U(r)$ を他の項に比べていつも無視することができる．そして自由運動の場合と同じ解を得る；すなわち $\psi\sim r^l$ となる (§33 参照)．最後にもしも場が $1/r^2$ より急速に（$s>2$ として $-1/r^s$ のように）無限大となるならば，波動関数は原点の近傍で $r^{s/4-1}$ に比例

する（§49の問題参照）．いずれの場合にも積 $r\psi$ は $r=0$ でゼロとなる．

つぎに遠距離では法則 $U\approx-\beta/r^2$ に従って減少し，近距離ではその形が任意の場の中のシュレーディンガー方程式の解の性質を研究しよう．はじめに $\gamma<1/4$ と仮定しよう．容易にわかるようにこの場合負のエネルギー準位は有限な数しか存在しない[1]．実際にエネルギーが $E=0$ のときシュレーディンガー方程式は遠距離で（35.1）の形をもち，その一般解は（35.4）で与えられる．しかし関数（35.4）は（$r\neq0$ では）ゼロをもたない；それゆえ求める動径波動関数のすべてのゼロ点は原点から有限の距離にあり，その数は常に有限である．いいかえると離散スペクトルの最後に位する $E=0$ なる準位の番号は有限である．

ところがもしも $\gamma>1/4$ であれば，離散スペクトルは無限個の負のエネルギー準位を含む．実際に $E=0$ なる状態の波動関数は遠距離で無限個のゼロ点をもつ式（35.9）の形をしており，その順位番号は必ず無限大である．

最後に全空間で場が $U=-\beta/r^2$ であるとしよう．すると $\gamma>1/4$ のとき粒子の落下が起こる．もしも $\gamma<1/4$ であれば負のエネルギー準位は全く存在しない．実際に $E=0$ なる状態の波動関数は全空間で（35.7）の形をしている．それは有限の距離にゼロ点を全くもたない；つまり（l が与えられたときの）最低のエネルギー準位に対応している．

§ 36. クーロン場の中の運動（球座標）

中心対称場の中の運動の重要な場合は**クーロン場**

$$U=\pm\frac{\alpha}{r}$$

の中の運動である（α は正の定数）．はじめにクーロン引力を考察しよう．これに対応して $U=-\alpha/r$ と書こう．一般的な考察から負のエネルギー固有値のスペクトルは離散的であり（そして準位の数は無限であり），正のエネルギー・スペクトルは連続であることがすでにわかっている．

動径関数に対する方程式（32.8）は次の形になる：

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{\alpha}{r}\right)R=0. \tag{36.1}$$

1）小さい r のところで粒子の落下が起こらないような場であることを仮定している．

互いに引きあう2個の粒子の相対運動を問題とする場合には，m は換算質量と考えなければならない．

クーロン場に関連した計算を行なうときには，すべての量をはかるのに通常の単位のかわりに，**クーロン単位**と呼ばれる特別の単位を用いると便利である．すなわち質量，長さおよび時間をはかる単位として，それぞれ次のものを選ぶ：

$$m,\qquad \frac{\hbar^2}{m\alpha},\qquad \frac{\hbar^3}{m\alpha^2}.$$

これ以外のすべての単位はこれから導くことができる．たとえばエネルギーの単位は

$$\frac{m\alpha^2}{\hbar^2}$$

となる．これから本節および次節では（とくに断わらない限り）いつもこの単位を用いることにする[1]．

方程式（36.1）は新しい単位で

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R+2\left(E+\frac{1}{r}\right)R=0 \qquad (36.2)$$

の形となる．

離散スペクトル

パラメーター E と変数 r のかわりに新しい量

$$n=\frac{1}{\sqrt{-2E}},\qquad \rho=\frac{2r}{n} \qquad (36.3)$$

を導入する．エネルギー E が負のとき n は正の実数である．方程式（36.2）は（36.3）を代入すると

1）もしも m を電子の質量 $m=9.11\times10^{-28}$g とし，$\alpha=e^2$ とすると（e は電子の電荷），クーロン単位は原子単位と呼ばれるものに一致する．長さの原子単位は

$$\frac{\hbar^2}{me^2}=0.529\times10^{-8}\,\mathrm{cm}$$

である（これはボーア半径と呼ばれる）．エネルギーの原子単位は

$$\frac{me^4}{\hbar^2}=4.36\times10^{-11}\,\mathrm{erg}=27.21\,\mathrm{eV}$$

である（この値の半分はリドベリー Ry と呼ばれる）電荷の原子単位は $e=4.80\times10^{-10}$ 静電単位である．原子単位の式へ移行するには形式的に $e=1$，$m=1$，$\hbar=1$ と置けばよい．しかし $\alpha=Ze^2$ の場合には，クーロン単位は原子単位と異なる．

$$R''+\frac{2}{\rho}R'+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0 \tag{36.4}$$

となる（ダッシュは ρ に関する微分を意味する）.

ρ が小さいとき有限性の必要条件を満足する解は ρ^l に比例する［(32.15) 参照］. ρ が大きいところでの R の漸近的な振舞いを明らかにするために，式 (36.4) の中で $1/\rho$ および $1/\rho^2$ に比例する項を無視すると，方程式

$$R''=\frac{R}{4}$$

が得られる．これから $R=e^{\pm\rho/2}$ となる．したがってわれわれにとって興味のある無限遠でゼロとなる解は，ρ が大きいところで $e^{-\rho/2}$ のように振舞う.

それゆえ次の置換を行なうのは自然であろう：

$$R=\rho^l e^{-\rho/2}w(\rho). \tag{36.5}$$

この結果方程式 (36.4) は次の形になる：

$$\rho w''+(2l+2-\rho)w'+(n-l-1)w=0. \tag{36.6}$$

この方程式の解は無限遠で ρ の有限のベキよりもはやく発散してはならないし，また $\rho=0$ で有限でなければならない．このあとの条件を満足する解は合流型超幾何関数

$$w=F(-n+l+1,\ 2l+2,\ \rho) \tag{36.7}$$

である（数学的補遺 § d 参照）[1]．無限遠における条件を満足する解は $-n+l+1$ の値が負の整数（またはゼロ）の場合にのみ得られる．このとき関数 (36.7) は $(n-l-1)$ 次の多項式に還元される．さもないと解は無限遠で e^ρ のように発散してしまう［(d.14) 参照］.

こうして数 n は正の整数でなければならず，しかも l を与えたとき

$$n\geqq l+1 \tag{36.8}$$

でなければならないという結論に達する．パラメーター n の定義 (36.3) を思い起こすと

$$E=-\frac{1}{2n^2},\qquad n=1,2,\cdots \tag{36.9}$$

を得る．これでクーロン場の中の離散スペクトルのエネルギー準位を決定する問題が解かれたわけである．基底準位 $E_1=-1/2$ とゼロとの間には無限個の準

1) 方程式 (36.6) のもう一つの解は $\rho\to0$ のとき ρ^{-2l-1} のように発散する.

位が存在することがわかる．二つの相隣る準位の間の間隔は n が増大するに従って減少する．準位は $E=0$ なる値に近づくにつれて密になり，ここで離散スペクトルは連続スペクトルにつながってしまう．ふつうの単位であらわすと式 (36.9) は次の形になる[1]：

$$E=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}. \tag{36.10}$$

整数 n は**主量子数**と呼ばれる．§32 で定義された動径量子数は

$$n_r=n-l-1$$

に等しい．

主量子数の値を与えると数 l は全部で n 個の異なる値

$$l=0, 1, \cdots, n-1 \tag{36.11}$$

をとることができる．エネルギーをあらわす式 (36.9) には数 n しか入っていない．したがって l は異なっても同じ n をもつすべての状態は同じエネルギーをもつ．このようにどの固有値も磁気量子数 m について縮退しているばかりでなく（これは中心対称の場におけるすべての運動に共通している），量子数 l についても縮退していることになる．この後者の縮退は（**偶然縮退**または**クーロン縮退**と呼ばれ）クーロン場に特有のものである．与えられた各 l の値には $2l+1$ 個の m の異なる値が対応している．したがって n 番目のエネルギー準位の縮退度は

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2 \tag{36.12}$$

である．

定常状態の波動関数は式 (36.5)，(36.7) によって決定される．二つのパラメーターが整数値をとる合流型超幾何関数は，定数因子を除いていわゆる**一般化ラゲール多項式**に一致する（数学的補遺 §d 参照）．したがって

$$R_{nl}=\text{const}\cdot\rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

となる．動径関数は条件

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr=1$$

---

1) 公式 (36.10) は量子力学の出現以前の 1913 年に N. ボーアによってはじめて与えられた．量子力学ではこの式は行列の方法により 1926 年に，W. パウリによって導かれた．またその数ヵ月後には E. シュレーディンガーによって波動方程式の方法を用いて導かれた．

によって規格化されなければならない.

その最終的な形は次のとおりである[1]：

$$R_{nl}=-\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}e^{-r/n}\left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right)$$
$$=\frac{2}{n^{l+2}(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}(2r)^l e^{-r/n}F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right) \quad (36.13)$$

[規格化のための積分の計算は，§f の積分 (f.6) を参照][2].

座標原点の近傍での R_{nl} の形は

$$R_{nl}\approx r^l\frac{2^{l+1}}{n^{2+l}(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \quad (36.14)$$

となる．また遠方では

$$R_{nl}\approx(-1)^{n-l-1}\frac{2^n}{n^{n+1}\sqrt{(n+l)!(n-l-1)!}}r^{n-1}e^{-r/n} \quad (36.15)$$

となる．基底状態の波動関数 R_{10} は $r\sim1$，つまり通常の単位では $r\sim\hbar^2/m\alpha$ の程度の距離で指数関数的に減衰する.

r のいろいろなベキの平均値は公式

$$\overline{r^k}=\int_0^\infty r^{k+2}R_{nl}^2dr$$

によって計算される．$\overline{r^k}$ に対する一般式は公式 (f.7) を用いて得られる．$\overline{r^k}$ の（正および負の k に対する）最初のいくつかの値をここに示しておこう：

$$\bar{r}=\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)], \qquad \overline{r^2}=\frac{n^2}{2}[5n^2+1-3l(l+1)],$$
$$\overline{r^{-1}}=\frac{1}{n^2}, \qquad \overline{r^{-2}}=\frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}. \quad (36.16)$$

---

1)　関数 R_{nl} の最初のいくつかをあらわな形に書いておこう：

$$R_{10}=2e^{-r}, \qquad R_{20}=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-r/2}\left(1-\frac{r}{2}\right),$$
$$R_{21}=\frac{1}{2\sqrt{6}}e^{-r/2}r, \qquad R_{30}=\frac{2}{3\sqrt{3}}e^{-r/3}\left(1-\frac{2}{3}r+\frac{2}{27}r^2\right),$$
$$R_{31}=\frac{8}{27\sqrt{6}}e^{-r/3}r\left(1-\frac{r}{6}\right), \qquad R_{32}=\frac{4}{81\sqrt{30}}e^{-r/3}r^2.$$

2)　規格化積分はラゲール多項式として式 (d.13) を代入し部分積分を行なうことによっても計算できる [これはルジャンドル多項式に対する積分 (c.8) の計算と同様である].

連続スペクトル

正のエネルギー固有値のスペクトルは連続であり，ゼロから無限大まで拡がっている．これらの各固有値は縮退しており，縮退度は無限大である．E の各値には0から ∞ までのすべての整数値の l をもつ無限個の状態（そして l が与えられればすべての可能な m をもつ状態）が対応する．

式（36.3）によって定義される数 n および変数 ρ はこの場合純虚数である：

$$n=-\frac{i}{\sqrt{2E}}=-\frac{i}{k},\qquad \rho=2ikr \tag{36.17}$$

ここで $k=\sqrt{2E}$ である[1]．連続スペクトルの動径固有関数は次の形をもつ：

$$R_{kl}=\frac{C_{kl}}{(2l+1)!}(2kr)^l e^{-ikr}F\left(\frac{i}{k}+l+1, 2l+2, 2ikr\right). \tag{36.18}$$

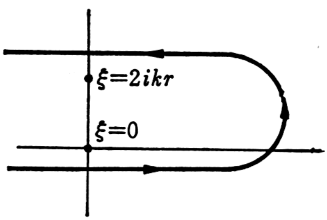
ここで C_{kl} は規格化因子である．この関数は複素積分の形にあらわすことができる（§d参照）：

$$R_{kl}=C_{kl}(2kr)^l e^{-ikr}\frac{1}{2\pi i}\oint e^{\xi}\left(1-\frac{2ikr}{\xi}\right)^{-\frac{i}{k}-l-1}\xi^{-2l-2}d\xi. \tag{36.19}$$

これは第10図に示した積分路に沿って行なわれる[2]．ここで $\xi=2ikr(t+1/2)$ なる置換を行なうとこの積分はより対称的な形になる：

$$R_{kl}=C_{kl}\frac{(-2kr)^{-l-1}}{2\pi}\oint e^{2ikrt}\left(t+\frac{1}{2}\right)^{\frac{i}{k}-l-1}\left(t-\frac{1}{2}\right)^{-\frac{i}{k}-l-1}dt. \tag{36.20}$$

（積分路は2点 $t=\pm1/2$ を正の方向に迂回する）．この式からただちにわかるように関数 R_{kl} は実である．



第 10 図

合流型超幾何関数の漸近展開（d.14）により波動関数 R_{kl} に対する同様の展開がただちに得られる．（d.14）の二つの項は関数 R_{kl} の中で二つの複素共役の項になるので，結局次式を得る：

1）n および ρ は複素共役の表示 $n=i/k$, $\rho=-2ikr$ によって定義することもできる．実関数 R_{kl} はもちろん n および ρ の定義のしかたに依存しない．

2）この積分路のかわりに特異点 $\xi=0$ および $\xi=2ikr$ を正の方向に迂回する任意の閉回路を用いることもできる．l が整数の場合に関数 $V(\xi)=\xi^{-n-l}(\xi-2ikr)^{n-l}$ は，このような閉回路に沿って一回りすると最初の値に戻る（§d参照）．

$$R_{kl}=C_{kl}\frac{e^{-\pi/2k}}{kr}$$
$$\times\mathrm{Re}\left\{\frac{\exp\left\{-i\left[kr-\frac{\pi}{2}(l+1)+\frac{1}{k}\ln 2kr\right]\right\}}{\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)}G\left(l+1+\frac{i}{k},\frac{i}{k}-l,-2ikr\right)\right\}. \tag{36.21}$$

もしも波動関数を《$k/2\pi$・目盛》で（すなわち条件 (33.4) によって）規格化すると，規格化定数 C_{kl} は

$$C_{kl}=2ke^{\pi/2k}\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\right| \tag{36.22}$$

となる．実際に r の大きいところの R_{kl} の漸近式［展開（36.21）の最初の項］はこのとき

$$R_{kl}\approx\frac{2}{r}\sin\left(kr+\frac{1}{k}\ln 2kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right),$$
$$\delta_l=\arg\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right) \tag{36.23}$$

という形になり，中心対称場の中の連続スペクトルの規格化された波動関数の一般的な形（33.20）と一致する．式（36.23）は正弦の引数の中に対数項をもつ点で (33.20) と異なっている；しかし $\ln r$ は r が増大するとともに r 自身に比べてゆっくりと大きくなるので，無限大で発散する規格化積分を計算する場合にはこの項の存在は重要でない．

規格化因子の式 (36.22) の中にあるガンマ関数の絶対値は初等関数を用いてあらわすことができる．ガンマ関数のよく知られた性質

$$\Gamma(z+1)=z\Gamma(z),\qquad \Gamma(z)\Gamma(1-z)=\frac{z}{\sin\pi z}$$

を用いると

$$\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right)=\left(l+\frac{i}{k}\right)\cdots\left(1+\frac{i}{k}\right)\frac{i}{k}\Gamma\left(\frac{i}{k}\right),$$
$$\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)=\left(l-\frac{i}{k}\right)\cdots\left(1-\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)$$

を得る．そしてさらに

$$\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\right|=\left[\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right)\right]^{1/2}$$
$$=\sqrt{\frac{\pi}{k}}\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}}\sinh^{-1/2}\frac{\pi}{k}$$

を得る．したがって

$$C_{kl}=\left[\frac{8\pi k}{1-e^{-2\pi/k}}\right]^{1/2}\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}} \tag{36.24}$$

である（$l=0$ の場合積は 1 に置きかえられる）．

$k\to0$ への極限移行により，エネルギーがゼロに等しい特別の場合の動径関数を得ることができる．$k\to0$ のとき

$$F\left(\frac{i}{k}+l+1,\ 2l+2,\ 2ikr\right)\longrightarrow F\left(\frac{i}{k},\ 2l+2,\ 2ikr\right)$$
$$=1-\frac{2r}{(2l+2)1!}+\frac{(2r)^2}{(2l+2)(2l+3)2!}-\cdots=(2l+1)!(2r)^{-l-1/2}J_{2l+1}(\sqrt{8r})$$

である．ここで J_{2l+1} はベッセル関数である．$k\to0$ のとき係数 C_{kl} (36.24) は

$$C_{kl}\approx\sqrt{8\pi}k^{-l+1/2}$$

となる．これから

$$\left.\frac{R_{kl}}{\sqrt{k}}\right|_{k\to0}=\sqrt{\frac{4\pi}{r}}J_{2l+1}(\sqrt{8r}) \tag{36.25}$$

を得る．この関数の r が大きいところの漸近形は次のようになる[1]：

$$\left.\frac{R_{kl}}{\sqrt{k}}\right|_{k\to0}=\left(\frac{8}{r^3}\right)^{1/4}\sin\left(\sqrt{8r}-l\pi-\frac{\pi}{4}\right). \tag{36.26}$$

因子 $\sqrt{k}$ は《エネルギー目盛》の規格化に移行すると，すなわち関数 R_{kl} から (33.5) の関数 R_{El} へ移行すると消える．つまり関数 R_{El} は $E\to0$ の極限で有限にとどまる．

クーロン斥力場 ($U=\alpha/r$) ではエネルギー固有値は正の連続スペクトルのみである．この場の中のシュレーディンガー方程式は，引力場に対する方程式から r の符号を変えることによって形式的に得られる．したがって定常状態の波動関数は (36.18) から同じ置きかえによってただちに得られる．規格化係数はふたたび漸近式によって決定され．結局次式を得る：

---

1) この式は $(l+1/2)^2\ll r\ll k^{-2}$ なる範囲の運動に当てはまる準古典的な近似 (§ 49) に対応することを指摘しておこう．

$$R_{kl}=\frac{C_{kl}}{(2l+1)!}(2kr)^l e^{ikr}F\left(\frac{i}{k}+l+1,\ 2l+2,\ -2ikr\right),$$

$$C_{kl}=2ke^{-\pi/2k}\left|\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right)\right|=\left(\frac{8\pi k}{e^{2\pi/k}-1}\right)^{1/2}\prod_{s=1}^{l}\sqrt{s^2+\frac{1}{k^2}}. \quad (36.27)$$

この関数の r の大きいところの漸近式は次の形をもつ：

$$R_{kl}\approx\frac{2}{r}\sin\left(kr-\frac{1}{k}\ln 2kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right),$$
$$\delta_l=\arg\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right). \quad (36.28)$$

クーロン縮退の性質

クーロン場における粒子の古典的運動には，この場に特有な保存則が存在する．引力場の場合には

$$\boldsymbol{A}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}-[\boldsymbol{pl}]=\text{const} \quad (36.29)$$

(第 I 巻『力学』§15 を見よ)．量子力学ではこの量は演算子

$$\hat{\boldsymbol{A}}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{1}{2}([\hat{\boldsymbol{p}}\hat{\boldsymbol{l}}]-[\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{p}}]) \quad (36.30)$$

に対応し，容易に確かめられるように，ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2-1/r$ と可換である．

直接計算を行って，演算子 $\hat{A}_i$ に対して相互間に，また角運動量との間に次の交換則が得られる．

$$\{\hat{l}_i, \hat{A}_k\}=ie_{ikl}\hat{A}_l, \qquad \{\hat{A}_i, \hat{A}_k\}=-2i\hat{H}e_{ikl}\hat{l}_l. \quad (36.31)$$

演算子 $\hat{A}_i$ 相互間の非可換性は，量 A_x, A_y, A_z が量子力学において同時に確定値をとることができないことを意味している．これらの演算子の一つ例えば $\hat{A}_z$ は，角運動量の同一成分 $\hat{l}_z$ と可換であるが，角運動量の自乗の演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ とは可換でない．他の保存量と同時に測定することのできない新しい保存量が存在するために，準位の付加的な縮退を生ずる (§10)．これがつまりクーロン場に特有な，エネルギーの離散準位の《偶然》縮退である．

このような縮退の起原は，量子力学におけるクーロン問題に特有の（空間回転に関連した対称性と較べて）高位の対称性を用いて定式化することができる（ヴェ・ア・フォック В. А. Фок, 1935)．

このためには，一定の負のエネルギーをもつ離散スペクトルの状態に対して

は，(36.31) の第 2 の関係式の右辺で $\hat{H}$ を E に置き換え，$\hat{A}_i$ の代りに演算子 $\hat{u}_i=\hat{A}_i/\sqrt{-2E}$ を導入してもよいことに気づく．これらの演算子に対する交換則は次の形をもつ：

$$\{\hat{l}_i, \hat{u}_k\}=ie_{ikl}\hat{u}_l, \qquad \{\hat{u}_i, \hat{u}_k\}=ie_{ikl}\hat{l}_l. \qquad (36.32)$$

規則 $\{\hat{l}_i, \hat{l}_k\}=ie_{ikl}\hat{l}_l$ とともに，これらの関係は 4 次元ユークリッド空間における無限小回転の演算子の交換則と一致する[1]．これがつまり量子力学におけるクーロン問題の対称性である[2]．

交換関係 (36.32) からクーロン場におけるエネルギー準位に対する表式を新たに得ることができる[3]．$\hat{\boldsymbol{l}}$ および $\hat{\boldsymbol{u}}$ の代りに演算子

$$\hat{\boldsymbol{j}}_1=\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{u}}), \qquad \hat{\boldsymbol{j}}_2=\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{l}}-\hat{\boldsymbol{u}}) \qquad (36.33)$$

を用いて交換関係を書き直そう．すると

$$\{\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{1k}\}=ie_{ikl}\hat{j}_{1l}, \qquad \{\hat{j}_{2i}, \hat{j}_{2k}\}=ie_{ikl}\hat{j}_{2l}, \qquad \{\hat{j}_{1i}, \hat{j}_{2k}\}=0 \quad (36.34)$$

を得る．これらの規則は，二つの独立な 3 次元角運動量ベクトルの交換則と形式的に同じである．したがって自乗 $\boldsymbol{j}_1^2$ および $\boldsymbol{j}_2^2$ の各々の固有値は $j_1(j_1+1)$ および $j_2(j_2+1)$ である．ここで j_1，$j_2=0$, 1/2, 1, 3/2, …[4]．他方演算子 $\hat{\boldsymbol{u}}$ および $\hat{\boldsymbol{l}}=[\boldsymbol{r}\hat{\boldsymbol{p}}]$ の定義により，簡単な計算の結果

$$\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{u}}=\hat{\boldsymbol{u}}\hat{\boldsymbol{l}}=0,$$

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2+\hat{\boldsymbol{u}}^2=-1-\frac{1}{2E}$$

を得る（和 $\hat{\boldsymbol{l}}^2+\hat{\boldsymbol{u}}^2$ の計算ではふたたび $\hat{H}$ を E に置きかえた）．これから

$$\boldsymbol{j}_1^2=\boldsymbol{j}_2^2=-\frac{1}{4}\left(1+\frac{1}{2E}\right)=j(j+1)$$

（ここで $j\equiv j_1=j_2$）．したがって $E=-1/2(2j+1)^2$ を得る．記号

---

1) ここで $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ は 4 次元デカルト座標系 x, y, z, u の平面 yz, xz, xy 内における無限小回転の演算子の役を果たし，同様に $\hat{u}_x, \hat{u}_y, \hat{u}_z$ は平面 xu, yu, zu 内における無限小回転の演算子の役を果たしている．

2) この対称性は運動量表示における波動関数においても，あらわな形で現われている．B. A. Фок, Изв. АН СССР, серия физ., No. 2, 169頁 (1935)；V. A. Fock, Zeitschrift für Physik **98**, 145 (1935).

3) この議論はパウリの議論 (1926) と本質的に同じである．

4) ここでは少し先回りをして角運動量の性質を用いたが，これについては §54 で論ずるであろう（値 j が整数値および半整数値をとる可能性）．

$$2j+1=n, \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{36.35}$$

を用いると，求めている結果 $E=-1/2n^2$ を得る．準位の縮退度は，当然ながら $(2j_1+1)(2j_2+1)=(2j+1)^2=n^2$．最後に，$\hat{\boldsymbol{l}}=\hat{\boldsymbol{j}}_1+\hat{\boldsymbol{j}}_2$ であるので，与えられた $j_1=j_2=(n-1)/2$ に対して，軌道角運動量 l は 0 から $2j=n-1$ までの値をとる[1]．

問　　題

1. 水素原子の基底状態における運動量のいろいろな値の確率分布を求めよ．

解[2]　基底状態の波動関数は

$$\psi=R_{10}Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}$$

である．この状態の $\boldsymbol{p}$–表示の波動関数は，これから積分

$$a(\boldsymbol{p})=\int\psi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{pr}}dV$$

によって得られる［(15.10) 参照］．この積分は $\boldsymbol{p}$ 方向に極軸をもつ球座標へ移行して計算される．その結果

$$a(\boldsymbol{p})=\frac{8\sqrt{\pi}}{(1+p^2)^2}$$

を得る．そして $\boldsymbol{p}$–表示における確率密度は $|a(\boldsymbol{p})|^2/(2\pi)^3$ である．

2. 水素原子の基底状態において核および電子によってつくられる場の平均ポテンシャルを求めよ．

解　任意の点 $\boldsymbol{r}$ に《電子雲》によってつくられる平均ポテンシャル φ_e は，もっとも簡

---

1)　角運動量 l の異なる値をもつ準位の《偶然》縮退は，中心対称場 $U=m\omega^2r^2/2$ における運動（3次元振動子，§33の問題4を見よ）に対しても起こる．この縮退もまたハミルトニアンの付加的な対称性と関連している．この場合この対称性は，$\hat{H}=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m+m\omega^2\boldsymbol{r}^2/2$ において演算子 $\hat{p}_i$ も座標 $\hat{x}_i$ と同様に自乗の和の形で入っている結果として生じている．それらの代りに演算子

$$\hat{a}_i=\frac{m\omega x_i+i\hat{p}_i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \qquad \hat{a}_i^+=\frac{m\omega x_i-i\hat{p}_i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$$

を用いると

$$\hat{H}=\hbar\omega\left[\hat{\boldsymbol{a}}^+\hat{\boldsymbol{a}}+\frac{3}{2}\right]$$

を得る．この式は，（すべての中心対称場にある粒子のハミルトニアンを不変にする）3次元回転群よりも広い群を形成する変換，すなわち演算子 $\hat{a}_i^+$ および $\hat{a}_i$ の任意のユニタリー変換に関して不変である．

量子力学におけるクーロン場および振動子場の特殊性（偶然縮退の存在）は，古典力学においてこれらの場には（そしてこれらの場のみに）粒子の閉じた軌道が存在するという特殊性に対応していることに気づく．

2)　問題1と2では原子単位を用いる．

単には電荷密度 $\rho=-|\psi|^2$ をもつポアッソン方程式の球対称な解として決定される：

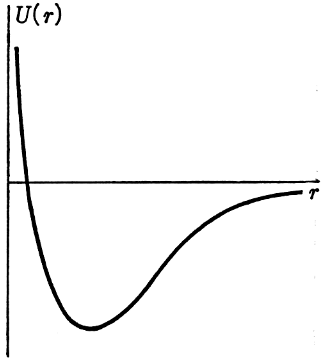
$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi_e)=4e^{-2r}.$$

この方程式を積分し，$\varphi_e(0)$ が有限，また $\varphi_e(\infty)=0$ となるように定数を選び，これに核の場のポテンシャルをつけ加えると次式を得る：

$$\varphi=\frac{1}{r}+\varphi_e(r)=\left(\frac{1}{r}+1\right)e^{-2r}.$$

$r\ll1$ のところで $\varphi\approx1/r$（核の場）となり，$r\gg1$ のところでポテンシャル $\varphi\approx e^{-2r}$（電子による核の遮蔽）を得る．

3. ポテンシャル・エネルギー $U=A/r^2-B/r$（第 11 図）をもつ中心対称場の中を運動する粒子のエネルギー準位を求めよ．



第 11 図

解　正のエネルギー・スペクトルは連続であり，負のエネルギー・スペクトルは離散的である；後者を研究しよう．動径関数に対するシュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)\frac{1}{r^2}-\frac{A}{r^2}+\frac{B}{r}\right)R=0 \tag{1}$$

である．新しい変数

$$\rho=\frac{2\sqrt{-2mE}}{\hbar}r$$

および記号

$$\frac{2mA}{\hbar^2}+l(l+1)=s(s+1), \tag{2}$$

$$\frac{B}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{-2E}}=n \tag{3}$$

を導入する．すると方程式 (1) は次の形をとる：

$$R''+\frac{2}{\rho}R'+\left(-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{s(s+1)}{\rho^2}\right)R=0.$$

これは (36.4) と同じ形をしている．したがって必要条件を満足する解は次のようになることがただちに結論される：

$$R=\rho^s e^{-\rho/2}F(-n+s+1, 2s+2, \rho).$$

ここで $n-s-1=p$ は正の整数（またはゼロ）でなければならない．また s としては方程式 (2) の正の根をとらなければならない．したがって定義 (3) により，エネルギー準位は

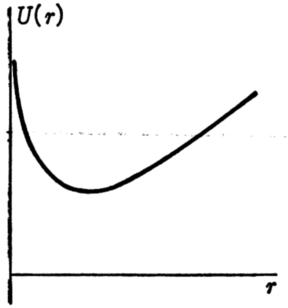
$$-E_p=\frac{2B^2m}{\hbar^2}\left[2p+1+\sqrt{(2l+1)^2+\frac{8mA}{\hbar^2}}\right]^{-2}$$

となる.

4. 同じく $U=\frac{A}{r^2}+Br^2$（第12図）の場合を解け.

解　この場合は離散スペクトルしか存在しない. シュレーディンガー方程式は次のとおりである：

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}-\frac{A}{r^2}-Br^2\right)R=0.$$



第12図

変数

$$\xi=\frac{\sqrt{2mB}}{\hbar}r^2$$

および記号

$$l(l+1)+\frac{2mA}{\hbar^2}=2s(2s+1),$$

$$\sqrt{\frac{2m}{B}}\frac{E}{\hbar}=4(n+s)+3$$

を導入すると, 方程式

$$\xi R''+\frac{3}{2}R'+\left[n+s+\frac{3}{4}-\frac{\xi}{4}-\frac{s\left(s+\frac{1}{2}\right)}{\xi}\right]R=0$$

を得る. 求める解は $\xi\to\infty$ のとき漸近的に $e^{-\xi/2}$ のように振舞い, 小さい ξ のところでは ξ^s に比例するように振舞う. ここで s は正の値

$$s=\frac{1}{4}\left[-1+\sqrt{(2l+1)^2+\frac{8mA}{\hbar^2}}\right]$$

をとらなければならない. したがって解は

$$R=e^{-\xi/2}\xi^s w$$

なる形に求められる. w に対しては方程式

$$\xi w''+\left(2s+\frac{3}{2}-\xi\right)w'+nw=0$$

が得られる. これから

$$w=F\left(-n,\ 2s+\frac{3}{2},\ \xi\right)$$

となる. このとき n は負でない整数でなければならない. したがってエネルギー準位としては等間隔の無限個の値

$$E_n=\hbar\sqrt{\frac{B}{2m}}\left[4n+2+\sqrt{(2l+1)^2+\frac{8mA}{\hbar^2}}\right],\qquad n=0,1,2,\cdots$$

を得る.

§ 37. クーロン場の中の運動（放物座標）

任意の中心対称場の中の運動では球座標で書かれたシュレーディンガー方程

式の変数分離はいつも可能である．クーロン場の場合にはいわゆる**放物座標**でも変数分離は可能になる．クーロン場の中の運動を放物座標で解くことは，たとえば（クーロン場以外の）外部電場の存在によって空間の中に特定の方向が選べるような一連の問題の研究の場合に有効である（§77）．

放物座標 ξ, η, φ は公式

$$x=\sqrt{\xi\eta}\cos\varphi, \qquad y=\sqrt{\xi\eta}\sin\varphi, \qquad z=\frac{1}{2}(\xi-\eta),$$

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}=\frac{1}{2}(\xi+\eta), \tag{37.1}$$

あるいは逆に

$$\xi=r+z, \qquad \eta=r-z, \qquad \varphi=\tan^{-1}\frac{y}{x} \tag{37.2}$$

によって定義される；ξ と η は 0 から ∞ までの値をとり，φ は 0 から 2π までの値をとる．$\xi=\text{const}$ および $\eta=\text{const}$ なる面は z 軸を回転軸とし原点を焦点とする回転放物面をあらわしている．この座標系は直交系である．長さの要素は式

$$dl^2=\frac{\xi+\eta}{4\xi}d\xi^2+\frac{\xi+\eta}{4\eta}d\eta^2+\xi\eta d\varphi^2 \tag{37.3}$$

で与えられ，体積要素は

$$dV=\frac{1}{4}(\xi+\eta)d\xi d\eta d\varphi \tag{37.4}$$

で与えられる．(37.3) よりラプラス演算子の表式は

$$\triangle=\frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{37.5}$$

となる．

クーロン引力場

$$U=-\frac{1}{r}=-\frac{2}{\xi+\eta}$$

の中の粒子のシュレーディンガー方程式は次の形になる：

$$\frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+2\left(E+\frac{2}{\xi+\eta}\right)\psi=0. \tag{37.6}$$

固有関数 ψ を次の形に求めよう：

$$\psi=f_1(\xi)f_2(\eta)e^{im\varphi}. \tag{37.7}$$

ここで m は磁気量子数である．この式を方程式（37.6）に代入し，$(\xi+\eta)/4$ を掛けて，ξ および η の変数分離を行なうと，f_1 および f_2 に対する次の式を得る：

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)+\left[\frac{E}{2}\xi-\frac{m^2}{4\xi}+\beta_1\right]f_1=0,\\ \frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left[\frac{E}{2}\eta-\frac{m^2}{4\eta}+\beta_2\right]f_2=0.\end{aligned} \tag{37.8}$$

ここで《分離パラメーター》β_1, β_2 は互いに次の関係で結ばれている：

$$\beta_1+\beta_2=1. \tag{37.9}$$

エネルギーの離散スペクトル（$E<0$）を考察しよう．E, ξ, η のかわりに

$$n=\frac{1}{\sqrt{-2E}}, \qquad \rho_1=\xi\sqrt{-2E}=\frac{\xi}{n}, \qquad \rho_2=\frac{\eta}{n} \tag{37.10}$$

なる量を導入しよう．すると f_1 に対する方程式は

$$\frac{d^2f_1}{d\rho_1^2}+\frac{1}{\rho_1}\frac{df_1}{d\rho_1}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{1}{\rho_1}\left(\frac{|m|+1}{2}+n_1\right)-\frac{m^2}{4\rho_1^2}\right]f_1=0 \tag{37.11}$$

となる．f_2 に対しても同様の方程式を得る．ここで記号

$$n_1=-\frac{|m|+1}{2}+n\beta_1, \qquad n_2=-\frac{|m|+1}{2}+n\beta_2 \tag{37.12}$$

を導入した．

方程式（36.4）の場合と同様にして，大きい ρ_1 のところで f_1 は $e^{-\rho_1/2}$ のように振舞い，小さい ρ_1 のところで $\rho_1^{|m|/2}$ のように振舞うことがわかる．したがって方程式（37.11）の解を

$$f_1(\rho_1)=e^{-\rho_1/2}\rho_1^{|m|/2}w_1(\rho_1)$$

の形に求めよう（f_2 に対しても同様）．すると w_1 に対して方程式

$$\rho_1 w_1''+(|m|+1-\rho_1)w_1'+n_1w_1=0$$

を得る．これは再び合流型超幾何関数の方程式である．有限性の条件を満足する解は

$$w_1=F(-n_1,\ |m|+1,\ \rho_1)$$

である．ここで n_1 は負でない整数でなければならない．

したがって放物座標では，離散スペクトルの各定常状態は三つの 整 数 に よ

って指定される：それは《放物量子数》n_1 と n_2 および磁気量子数 m である．数 n（《主量子数》）に対しては（37.9）および（37.12）により

$$n=n_1+n_2+|m|+1 \tag{37.13}$$

が得られる．エネルギー準位としてはもちろん前と同じ結果（36.9）が得られる．

n を与えると数 $|m|$ は0から $n-1$ までの n 個の異なる値をとることができる．n および $|m|$ を固定すると数 n_1 は0から $n-|m|-1$ までの $n-|m|$ 個の値をとる．与えられた $|m|$ に対して $m=\pm|m|$ なる関数を選ぶことができることを考慮すると，n を与えたとき全部で

$$2\sum_{m=1}^{n-1}(n-m)+(n-0)=n^2$$

個の異なる状態が存在することがわかる．これは§36で得られた結果と一致している．

離散スペクトルの波動関数 $\psi_{n_1n_2m}$ は，条件

$$\int|\psi_{n_1n_2m}|^2dV=\frac{1}{4}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^{2\pi}|\psi_{n_1n_2m}|^2(\xi+\eta)d\varphi d\xi d\eta=1 \tag{37.14}$$

によって規格化されなければならない．規格化された関数は次の形になる：

$$\psi_{n_1n_2m}=\frac{\sqrt{2}}{n^2}f_{n_1m}\left(\frac{\xi}{n}\right)f_{n_2m}\left(\frac{\eta}{n}\right)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \tag{37.15}$$

ここで

$$f_{pm}(\rho)=\frac{1}{|m|!}\sqrt{\frac{(p+|m|)!}{p!}}F(-p,|m|+1,\rho)e^{-\rho/2}\rho^{|m|/2}. \tag{37.16}$$

放物座標における波動関数は球座標における波動関数と異なり，$z=0$ の面に関して対称ではない．$n_1>n_2$ のときは粒子の滞在確率は $z<0$ の側よりも $z>0$ の側に大きく，$n_1<n_2$ のときは逆である．

エネルギーの連続スペクトル（$E>0$）には，方程式（37.8）のパラメーター β_1,β_2 の実の連続スペクトルが対応する（もちろん前と同じくこれらは関係式（37.9）によって結ばれている）．ここでは，わざわざこれに対応する波動関数を書き下すことはしない．方程式（37.8）は量 β_1,β_2 の《固有値》方程式とみなされ，（$E>0$ のとき）そのスペクトルは複素数にもなる．これに対応する波動関数は§135でクーロン場による散乱の問題を解くためにそれを用いるとき

に書くことにする．

定常状態 $|n_1n_2m\rangle$ の存在は，付加的な保存則（36.29）の存在と関連している．これらの状態では，エネルギーと並んで量 $l_z=m$ および A_z が確定値を持っている．演算子 $\hat{A}_z$ の対角行列要素を計算すると

$$A_z=\frac{n_1-n_2}{n} \tag{37.17}$$

を得る．ここで $u_z=n_1-n_2$ であり，《角運動量》$\mathbf{j}_1$ および $\mathbf{j}_2$ の投影は

$$j_{1z}=\frac{1}{2}(m+n_1-n_2)\equiv\mu_1,\qquad j_{2z}=\frac{1}{2}(m-n_1+n_2)\equiv\mu_2 \tag{37.18}$$

である*)．

状態 $|n_1n_2m\rangle$（あるいは $|n\mu_1\mu_2\rangle$ についても同様）のこれらの性質により，これらの波動関数と状態 $|nlm\rangle$ の波動関数とのあいだの関係を容易に確立することができる．$\mathbf{l}=\mathbf{j}_1+\mathbf{j}_2$ であるので，これらの記述法の一方から他方へ移行することは，二つの角運動量の合成に対応する波動関数を作る問題に帰着する（のちに§106で考察する）．《角運動量》$\mathbf{j}_1$ および $\mathbf{j}_2$ を用いると，状態 $|nlm\rangle$ および $|n_1n_2m\rangle$ は $|j_1j_2lm\rangle$ および $|j_1j_2\mu_1\mu_2\rangle$ と書かれ，ここで（36.35）および（37.13）により

$$j_1=j_2=\frac{n-1}{2}=\frac{n_1+n_2+|m|}{2} \tag{37.19}$$

である．一般公式（106.9）-（106.11）により

$$\begin{aligned}\psi_{nlm}&=\sum_{\mu_1+\mu_2=m}\langle lm|\mu_1\mu_2\rangle\psi_{n\mu_1\mu_2},\\ \psi_{n\mu_1\mu_2}&=\sum_{l=0}^{n-1}\langle l,\mu_1+\mu_2|\mu_1\mu_2\rangle\psi_{nlm}\end{aligned} \tag{37.20}$$

を得る（D. Park, 1960）．

*) 147頁の $\hat{u}_i$ の定義と $\hat{j}_i$ の定義（36.33）参照．（訳注）

第6章 摂 動 論

§ 38. 時間に依存しない摂動

シュレーディンガー方程式の正確な解が得られるのは，比較的少数のきわめて簡単な場合に限られる．量子力学の大多数の問題では，正確には解くことのできないひじょうに複雑な方程式が導かれる．しかし条件として大きさの程度の異なる量が問題の中にあらわれることがしばしばある．その中には小さな量もあって，それを無視してしまえば問題がいちじるしく簡単になって正確な解を求めることが可能になることがある．このような場合に，設定された物理の問題を解くための第一歩は，簡単化された問題を正確に解くことであり，そして第二歩は，簡単化された問題で落とされた小さな項から生ずる補正を近似的に計算することである．この補正を計算する一般的方法 の こ と を**摂動論**という．

あたえられた物理系のハミルトニアンが次の形をしていると考えよう：

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}.$$

ここで $\hat{V}$ は《非摂動》演算子 $\hat{H}_0$ に対する小さな補正項（**摂動**）をあらわしている．§38, §39 では時間にあらわに依存しない摂動 $\hat{V}$ を考察しよう（$\hat{H}_0$ についても同じように考える）．演算子 $\hat{V}$ を演算子 $\hat{H}_0$ にくらべて《小さい》とみなすことのできるための必要条件は以下で明らかになる．

離散スペクトルに対する摂動論の問題は次のように定式化できる．非摂動演算子 $\hat{H}_0$ の離散スペクトルの固有関数 $\psi_n^{(0)}$ と固有値 $E_n^{(0)}$ がわかっているものとする；すなわち方程式

$$\hat{H}_0\psi^{(0)}=E^{(0)}\psi^{(0)} \tag{38.1}$$

の正確な解がわかっているものとする．そこで方程式

$$\hat{H}\psi=(\hat{H}_0+\hat{V})\psi=E\psi \tag{38.2}$$

の近似解， すなわち摂動を含む演算子 $\hat{H}$ の固有関数 ψ_n と固有値 E_n に対する

近似式を求める．

この節では演算子 $\hat{H}_0$ のすべての固有値は縮退していないと仮定する． さらにはじめは導き方を簡単にするために，固有値は離散スペクトルだけをもっていると考える．

計算は最初から行列形式で行なうのが便利である．そのために求める関数 ψ を関数 $\psi_n^{(0)}$ で展開しよう：

$$\psi=\sum_m c_m\psi_m^{(0)}. \tag{38.3}$$

この展開式を（38.2）に代入すれば次式が得られる：

$$\sum_m c_m(E_m^{(0)}+\hat{V})\psi_m^{(0)}=\sum_m c_m E\psi_m^{(0)}.$$

この方程式の両辺に $\psi_k^{(0)*}$ を掛けて積分すると

$$(E-E_k^{(0)})c_k=\sum_m V_{km}c_m \tag{38.4}$$

が得られる．

ここで導入された V_{km} は，非摂動関数 $\psi_m^{(0)}$ を用いて次のように定義される摂動演算子 $\hat{V}$ の行列である：

$$V_{km}=\int\psi_k^{(0)*}\hat{V}\psi_m^{(0)}dq. \tag{38.5}$$

係数 c_m とエネルギー E を級数

$$E=E^{(0)}+E^{(1)}+E^{(2)}+\cdots,\qquad c_m=c_m^{(0)}+c_m^{(1)}+c_m^{(2)}+\cdots$$

の形に求めてみよう．ここで量 $E^{(1)}$, $c_m^{(1)}$ は摂動 $\hat{V}$ と同じ1次の微小量である．量 $E^{(2)}$, $c_m^{(2)}$ は2次の微小量，等々となる．

n 番目の固有値と固有関数に対する補正を求めよう．そのため $c_n^{(0)}=1$, $c_m^{(0)}=0$, $m\neq n$ と置く．1次近似を見つけるために，1次の項だけを残して $E=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}$, $c_k=c_k^{(0)}+c_k^{(1)}$ を方程式（38.4）の中に代入しよう．$k=n$ のときこの方程式は

$$E_n^{(1)}=V_{nn}=\int\psi_n^{(0)*}\hat{V}\psi_n^{(0)}dq \tag{38.6}$$

を与える．したがって固有値 $E_n^{(0)}$ に対する1次近似の補正は状態 $\psi_n^{(0)}$ における摂動の平均値に等しい．

$k\neq n$ のとき方程式（38.4）は

$$c_k^{(1)}=\frac{V_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}, \qquad k\neq n, \tag{38.7}$$

を与える．しかし $c_n^{(1)}$ は任意のまま残るので，関数 $\psi_n=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}$ が1次の項まで含めた精度で規格化されるように選ぶべきである．このためには $c_n^{(1)}=0$ と置くべきである．実際，関数

$$\psi_n^{(1)}=\sum_m{}' \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)} \tag{38.8}$$

（和の記号につけたダッシュは，m の和をとるとき $m=n$ の項を落とすことを意味している）は $\psi_n^{(0)}$ に直交しており，したがって $|\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}|^2$ の積分と1との差は2次の微小量にすぎない．

公式（38.8）は波動関数に対する1次近似の補正である．これからいま考察している方法が適用できるための条件を知ることができる．すなわち不等式

$$|V_{mn}|\ll|E_n^{(0)}-E_m^{(0)}| \tag{38.9}$$

が成り立たなければならない．つまり摂動の行列要素はそれに対応する非摂動エネルギー準位の差にくらべて小さくなければならない．

つぎに固有値 $E_n^{(0)}$ に対する2次近似の補正を求めよう．そのために（38.4）の中に $E=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}$, $c_k=c_k^{(0)}+c_k^{(1)}+c_k^{(2)}$ を代入する．そして2次の微小量の項を考察する．$k=n$ と置いた方程式は次式を与える：

$$E_n^{(2)}c_n^{(0)}=\sum_m{}' V_{nm}c_m^{(1)}.$$

これから

$$E_n^{(2)}=\sum_m{}' \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} \tag{38.10}$$

が得られる（ここで（38.7）の $c_m^{(1)}$ を代入し，演算子 $\hat{V}$ のエルミート性からくる $V_{mn}=V_{nm}^*$ を用いた）．

基底状態のエネルギーに対する2次近似の補正は常に負であることに注意しよう．実際，$E_n^{(0)}$ が最低値に対応するならば，（38.10）の和の各項はすべて負になる．

これ以上の近似もこれと似た方法で計算することができる．

ここで得られた結果は，演算子 $\hat{H}_0$ が連続スペクトルをあわせもつ場合にも（いままでと同じように離散スペクトルの摂動状態を問題とするかぎり）ただちに拡張できる．それには離散スペクトルについての和に，対応する連続スペ

クトルについての積分をただつけ加えればよい．連続スペクトルに属する異なる状態を連続値をとる添字 ν で区別しよう．ここで ν は，状態を完全に指定するのに十分な数の物理量の値を便宜上ひとまとめにしたものと考えよう（連続スペクトルの状態はたいてい縮退しているものであるが，その場合にはエネルギーの値だけでは状態を指定するのに不十分である）[1]．すると，たとえば (38.8) のかわりに

$$\psi_n^{(1)}=\sum_m{}' \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}+\int\frac{V_{\nu n}}{E_n^{(0)}-E_\nu}\psi_\nu^{(0)}d\nu \tag{38.11}$$

と書かなければならない．他の公式についても同様である．

また関数 $\psi_n=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}$ （$\psi_n^{(1)}$ は式 (38.8)）を用いて，任意の物理量 f の行列要素の摂動値を1次の精度まで計算した公式を求めておくと便利である．容易に次式が得られる：

$$f_{nm}=f_{mn}^{(0)}+\sum_k{}' \frac{V_{nk}f_{km}^{(0)}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}+\sum_k{}' \frac{V_{km}f_{nk}^{(0)}}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}. \tag{38.12}$$

第1の和では $k\neq n$，第2の和では $k\neq m$ である．

問　　題

1.　固有関数に対する2次近似の補正 $\psi_n^{(2)}$ を求めよ．

解　係数 $c_k^{(2)}(k\neq n)$ は，2次の項までとり入れた方程式 (38.4) で $(k\neq n)$ としたものから計算される．また係数 $c_n^{(2)}$ は関数 $\psi_n=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}+\psi_n^{(2)}$ が2次の精度で規格化されるように決める．結局次のようになる：

$$\psi_n^{(2)}=\sum_m{}'\sum_k{}' \frac{V_{mk}V_{kn}}{\hbar^2\omega_{nk}\omega_{nm}}\psi_m^{(0)}-\sum_m{}' \frac{V_{nn}V_{mn}}{\hbar^2\omega_{nm}^2}\psi_m^{(0)}-\frac{\psi_n^{(0)}}{2}\sum_m{}' \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2\omega_{nm}^2}.$$

ここで振動数

$$\omega_{nm}=\frac{1}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})$$

を導入した．

2.　エネルギー固有値に対する3次近似の補正を求めよ．

解　方程式 (38.4) で $k=n$ と置き，3次の項を書き出すと次式が得られる：

$$E_n^{(3)}=\sum_k{}'\sum_m{}' \frac{V_{nm}V_{mk}V_{kn}}{\hbar^2\omega_{mn}\omega_{kn}}-V_{nn}\sum_m{}' \frac{|V_{nm}|^2}{\hbar^2\omega_{mn}^2}.$$

3.　ハミルトニアン

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}+\alpha x^3+\beta x^4$$

1）このとき波動関数 $\psi_\nu^{(0)}$ は ν についての δ-関数で規格化される．

をもつ非調和線形振動子のエネルギー準位を求めよ．

解　x^3 と x^4 の行列要素は，x の行列要素の表式 (23.4) を用いれば行列の積の規則によってただちに求められる．x^3 の行列要素のうちゼロでないのは次のものである：

$$(x^3)_{n-3,n}=(x^3)_{n,n-3}=\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{8}},$$

$$(x^3)_{n-1,n}=(x^3)_{n,n-1}=\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{9n^3}{8}}.$$

この行列の対角要素はゼロである．したがってハミルトニアン中の αx^3 の項（これは調和振動子に対する摂動とみなされる）の1次近似の補正は存在しない．この項の2次近似の補正は，βx^4 の項からの1次近似の補正と同程度である．x^4 の対角行列要素は

$$(x^4)_{n,n}=\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\frac{3}{4}(2n^2+2n+1)$$

である．一般公式 (38.6) と (38.10) を用いれば，結局非調和振動子のエネルギー準位に対する次のような近似式が得られる：

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{15}{4}\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right)+\frac{3}{2}\beta\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right).$$

4.　無限に高い壁で囲まれた球対称のポテンシャルの井戸が，（体積を変えずに）わずかに変形して，半軸が $a=b$ と c のやや引きのばされた，あるいは，やや圧しつぶされた回転楕円体の形になった．このように変形した井戸の中にある粒子のエネルギー準位の分裂を求めよ（ア・ベ・ミグダル A. E. Мигдал, 1959)．

解　井戸の境界の方程式

$$\frac{x^2+y^2}{a^2}+\frac{z^2}{c^2}=1$$

は，変数の置き換え $x\to ax/R$, $y\to ay/R$, $z\to cz/R$ によって，半径 R の球の方程式：$x^2+y^2+z^2=R^2$ に変わる．同じ置き換えによって，粒子のハミルトニアン $H=\hat{p}^2/2M=-\hbar^2\triangle/2M$ （M は粒子の質量，エネルギーは井戸の底から計る）は，$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ となる．ここで，

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2M}\triangle,\qquad \hat{V}=-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{R^2}{a^2}-1\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+\left(\frac{R^2}{c^2}-1\right)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]$$

である．したがって，楕円体形の井戸の中の運動の問題は，球形の井戸の中の運動の問題になる．楕円体と半径 $R=(a^2c)^{1/3}$ の球の差がわずかであれば，$\hat{V}$ を小さな摂動と見なすことができる．次式

$$a\approx R\left(1-\frac{\beta}{3}\right),\qquad c\approx R\left(1+\frac{2\beta}{3}\right)$$

によって《楕円体率》$\beta(|\beta|\ll 1)$ を導入すれば，摂動演算子は次の形にあらわされる：

$$\hat{V}=\frac{\beta}{3M}(\hat{p}^2-3\hat{p}_z^2).$$

粒子のエネルギー準位の球形の井戸の準位からの変化は，1次の摂動論によって

$$\triangle E_{nlm}=E_{nlm}-E_{nl}^{(0)}=\langle nlm|V|nlm\rangle$$

となる（l と m は粒子の角運動量の大きさと回転楕円体の軸方向への投影である．n は l を与えたときの球形の井戸の中の準位の番号である．また，l は m の値には依存しない）．表式 $p^2-3p_z^2$ は既約テンソル（跡がゼロのテンソル，$\delta_{ik}p^2-3p_ip_k$）の zz 成分であることに注意すると，(107.2) と (107.6) によって行列要素 $\langle nlm|V|nlm\rangle$ は

$$(-1)^m\begin{pmatrix} l & 2 & l \\ -m & 0 & m\end{pmatrix}$$

に比例することがわかる．したがって，

$$\langle nlm|V|nlm\rangle=\left(1-\frac{3m^2}{l(l+1)}\right)\langle nl0|V|nl0\rangle$$

となる（$3j$ 記号の表は§106 の表 9 に与えられている）．さらに，次のように書こう：

$$\langle nl0|V|nl0\rangle=\frac{2}{3}\beta E_{nl}^{(0)}+\beta\frac{\hbar^2}{M}\left\langle nl0\left|\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right|nl0\right\rangle$$
$$=\frac{2}{3}\beta E_{nl}^{(0)}-\frac{\beta\hbar^2}{M}\int\left|\frac{\partial\psi_{nl0}}{\partial z}\right|^2 r^2drdo$$

（第1項では球形の井戸のシュレーディンガー方程式 $\hat{H}_0\psi_{nlm}=E_{nl}^{(0)}\psi_{nlm}$ を用いた．また第2項では，部分積分を行なった）．関数 $\psi_{nl0}=R_{nl}(r)Y_{l0}(\theta,\varphi)$ の微分は，(28.11) の形の Y_{l0} の表式を用いて，次のように得られる：

$$\frac{\partial}{\partial z}\psi_{nl0}=\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\psi_{nl0}$$
$$=-\frac{i(l+1)}{[4(l+1)^2-1]^{1/2}}\left(R_{nl}'-\frac{l}{r}R_{nl}\right)Y_{l+1,0}+\frac{il}{[4l^2-1]^{1/2}}\left(R_{nl}'+\frac{l+1}{r}R_{nl}\right)Y_{l-1,0}.$$

動径積分は次の公式によって計算される：

$$\int_0^\infty R_{nl}R_{nl}'rdr=-\frac{1}{2}\int_0^\infty R_{nl}^2dr,\qquad \int_0^\infty R_{nl}'^2r^2dr=\frac{2M}{\hbar^2}E_{nl}^{(0)}-l(l+1)\int_0^\infty R_{nl}^2dr.$$

これらの公式は部分積分と動径関数に対するシュレーディンガー方程式 (33.3)

$$R_{nl}''+\frac{2}{r}R_{nl}'-\frac{l(l+1)}{r^2}R_{nl}=-\frac{2M}{\hbar^2}E_{nl}^{(0)}$$

を用いればえられる．R_{nl}^2 の積分を含む項は合わせると簡単になって，最終結果は，

$$\varDelta E_{nlm}=4\beta\frac{l(l+1)}{(2l-1)(2l+3)}\left[\frac{m^2}{l(l+1)}-\frac{1}{3}\right]E_{nl}^{(0)}$$

となる．これから

$$\frac{1}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}E_{nlm}=E_{nl}^{(0)}$$

であることがわかる．すなわち，多重項の《重心》は移動しない．

§39. 永年方程式

つぎに非摂動演算子 $\hat{H}_0$ が縮退した固有値をもつ場合を考えよう．同一のエネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ に属する固有関数を $\psi_n^{(0)},\psi_{n'}^{(0)},\cdots$ であらわそう．すでに知

っているように，これらの関数の選び方は一通りではない．これらの関数のかわりに，これらの関数の任意の s 個の独立な線形結合を選ぶことができる（s は準位 $E_n^{(0)}$ の縮退度）．しかし微小な摂動を加えた結果生ずる波動関数の変化も微小であるという要求を波動関数に課せば，この選び方は任意でなくなる．

ひとまず $\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)}, \cdots$ を任意に選ばれたある非摂動固有関数と考えよう．ゼロ次近似の正しい関数は

$$c_n^{(0)}\psi_n^{(0)}+c_{n'}^{(0)}\psi_{n'}^{(0)}+\cdots$$

の形をした線形結合である．この線形結合の係数は，固有値の1次近似の補正とともに次のようにして決めることができる．

$k=n, n', \cdots$ と置いて方程式（38.4）を書き下し，1次近似として $E=E_n^{(0)}+E^{(1)}$ を代入すればよい．また数 c_k としてはゼロ次の値 $c_n=c_n^{(0)}, c_{n'}=c_n^{(0)}, \cdots$；$c_m=0, m\neq n, n', \cdots$ に限っても十分である．そうすると

$$E^{(1)}c_n^{(0)}=\sum_{n'} V_{nn'}c_{n'}^{(0)},$$

あるいは

$$\sum_{n'}(V_{nn'}-E^{(1)}\delta_{nn'})c_{n'}^{(0)}=0 \qquad (39.1)$$

が得られる．ここで n, n' は与えられた非摂動固有値 $E_n^{(0)}$ に属する状態の番号をすべてとるものとする．この数 $c_n^{(0)}$ に対する斉次線形連立方程式は，未知数にかかる係数でつくった行列式がゼロという条件の下でのみゼロでない解をもつ．したがって次の方程式が得られる：

$$|V_{nn'}-E^{(1)}\delta_{nn'}|=0. \qquad (39.2)$$

この方程式は $E^{(1)}$ について s 次であり，一般に s 個の異なる実根をもつ．これらの根が求めている固有値に対する1次近似の補正である．方程式（39.2）は**永年方程式**と呼ばれる[1]．その根の和は対角行列要素 $V_{nn}, V_{n'n'}, \cdots$ の和（これは方程式の中の $E^{(1)s-1}$ にかかる係数）に等しいことに注意しよう．

方程式（39.2）の根を連立方程式（39.1）に順番に代入してこれを解くと，係数 $c_n^{(0)}$ が得られ，したがってゼロ次近似の固有関数が決まる．

摂動の結果，最初に縮退していたエネルギー準位も一般には縮退しなくなる（方程式（39.2）の根は一般には異なっている）．これを摂動によって縮退が《とれる》という．縮退のとれ方は完全なこともあるが部分的なこともある

1）この名称は天体力学に由来している．

(あとの場合には摂動を加えると最初より低い縮退度が残る).

なんらかの理由で，互いに縮退した一群の状態 $n, n', \cdots$ 間の遷移の行列要素が特別に小さかったり（ときにはゼロであったり）することがある．そのようなときには，行列要素 $V_{nn'}$ を1次で考慮する以外に異なるエネルギーをもつ状態への遷移の行列要素 V_{nm} $(m \neq n, n', \cdots)$ をもっと高次まで考慮することが意味をもってくる．行列要素 V_{mn} の2次を考慮することで，これをやってみよう．

$k=n$ と置いた方程式 (38.4) の左辺で $E=E_n^{(0)}+E^{(1)}$ としよう（記号 $E^{(1)}$ は，いまの近似でのエネルギーに対する補正である）．c_n のかわりに $c_n^{(0)}$ と書こう．$m \neq n, n', \cdots$ となるすべての m に対して $c_m^{(0)}=0$ であることを考慮すれば，

$$E^{(1)} c_n^{(0)} = \sum_m V_{nm} c_m^{(1)} + \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)} \tag{39.3}$$

を得る．また $k=m \neq n, n', \cdots$ と置いた方程式 (38.4) は1次の精度で

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) c_m^{(1)} = \sum_{n'} V_{mn'} c_{n'}^{(0)}$$

となる．これから

$$c_m^{(1)} = \sum_{n'} \frac{V_{mn'}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} c_{n'}^{(0)}$$

が得られる．これを (39.3) に代入すれば

$$E^{(1)} c_n^{(0)} = \sum_{n'} c_{n'}^{(0)} \left(V_{nn'} + \sum_m \frac{V_{nm} V_{mn'}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right)$$

が得られる．いまの場合にはこの連立方程式が連立方程式 (39.1) のかわりになっている．この方程式の解の存在条件から，(39.2) で置換

$$V_{nn'} \longrightarrow V_{nn'} + \sum_m \frac{V_{nm} V_{mn'}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{39.4}$$

を行なった永年方程式が導かれる．

問　題

1.　2重に縮退した準位の固有値に対する1次近似の補正と正しいゼロ次近似の関数を求めよ．

解　方程式 (39.2) は次の形になる：

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{21} \\ V_{12} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

(添字1, 2はこの2重縮退準位の任意に選んだ二つの非摂動固有関数 $\psi_1^{(0)}$ と $\psi_2^{(0)}$ に対応

している)．これを解くと

$$E^{(1)}=\frac{1}{2}[V_{11}+V_{22}\pm\hbar\omega^{(1)}] \quad (1)$$

が得られる．ここで，補正 $E^{(1)}$ の二つある値の差をあらわすものとして，記号

$$\hbar\omega^{(1)}=\sqrt{(V_{11}-V_{22})^2+4|V_{12}|^2}$$

を導入した．さらにこれらの $E^{(1)}$ の値を入れて方程式 (39.1) を解くと，ゼロ次近似の規格化された正しい関数 $\psi^{(0)}=c_1^{(0)}\psi_1^{(0)}+c_2^{(0)}\psi_2^{(0)}$ の中の係数として次の値が得られる：

$$\begin{aligned} c_1^{(0)}&=\left\{\frac{V_{12}}{2|V_{12}|}\left[1\pm\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right]\right\}^{1/2}, \\ c_2^{(0)}&=\pm\left\{\frac{V_{12}}{2|V_{12}|}\left[1\mp\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right]\right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2)$$

2. 固有関数に対する1次近似および固有値に対する2次近似の補正の公式を導け．

解　関数 $\psi_n^{(0)}$ としては正しいゼロ次近似の関数を選んだとしよう．これを用いて計算した行列要素 $V_{nn'}$ は（縮退した同じ準位に属する関数をあらわす）添字 n, n' について対角である．そして対角要素 $V_{nn}, V_{n'n'}$ は対応する1次近似の補正 $E_n^{(1)}, E_{n'}^{(1)}, \cdots$ に等しい．

ゼロ次近似では $E=E_n^{(0)}$, $c_n^{(0)}=1$, $c_m^{(0)}=0$ $(m\neq n)$ となっているような固有関数 $\psi_n^{(0)}$ に対する摂動を考えよう．1次近似では $E=E_n^{(0)}+V_{nn}$, $c_n=1+c_n^{(1)}$, $c_m=c_m^{(1)}$ である．一般の連立方程式 (38.4) の中で $k\neq n, n', \cdots$ と置き，その中の1次の項だけを残せば

$$(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})c_k^{(1)}=V_{kn}c_n^{(0)}=V_{kn}$$

と書ける．これから

$$c_k^{(1)}=\frac{V_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} \qquad (k\neq n, n', \cdots \text{とする}) \quad (1)$$

である．さらに $k=n'$ と置いた方程式を書き，その中で2次の項を残せば次のようになる：

$$E_n^{(1)}c_{n'}^{(1)}=V_{n'n'}c_{n'}^{(1)}+\sum_m{}' V_{n'm}c_m^{(1)}$$

(m についての和の中には $m=n, n', \cdots$ の項は入らない)．$E_n^{(1)}=V_{nn}$ と $c_m^{(1)}$ の式 (1) を代入すれば，$n'\neq n$ に対して

$$c_{n'}^{(1)}=\frac{1}{(V_{nn}-V_{n'n'})}\sum_m{}'\frac{V_{n'm}V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} \quad (2)$$

が得られる（係数 $c_n^{(1)}$ の方はこの近似ではゼロに等しい）．公式 (1)，(2) は固有関数に対する1次近似の補正 $\psi_n^{(1)}=\sum_m c_m^{(1)}\psi_m^{(0)}$ を定める[1]．

最後に $k=n$ と置いて方程式 (38.4) の中で2次の項を計算すると，エネルギーに対す

1) (1) と (2) の値が小さいという条件，（したがって，ここで考察されている摂動論の方法が適用できるための条件）からは，エネルギーの異なる（ゼロ次近似で縮退していない，訳者）準位に属する状態間の遷移に対してだけ，これまで通りの条件 (38.9) が導かれることに注意しよう．縮退した同じ準位に属する状態間の遷移の方はすでに永年方程式によって，ある意味で正確に考慮されている．

る2次の補正として次の公式を得る：

$$E_n^{(2)}=\sum_m{}' \frac{V_{nm}V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}. \tag{3}$$

これは形式的には (38.10) と同じである．

3.　はじめの時刻 $t=0$ に系は2重に縮退した準位に属する状態 $\psi_1^{(0)}$ にあったとする．それに続く時刻 t に系が同じエネルギーのもう一方の状態 $\psi_2^{(0)}$ にある確率を求めよ．この遷移は一定の摂動によって起こるものとする．

解　ゼロ次近似の正しい関数

$$\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2, \qquad \psi'=c_1'\psi_1+c_2'\psi_2$$

をつくろう．ここで c_1, c_2 および c_1', c_2' は，問題1の式 (2) で決まる2対の係数である(簡単のためすべての量から添字 $^{(0)}$ を落とした)．

逆に解くと

$$\psi_1=\frac{c_2'\psi-c_2\psi'}{c_1c_2'-c_1'c_2}.$$

関数 ψ と ψ' は摂動をうけたエネルギー $E+E^{(1)}$ と $E+E^{(1)\prime}$ の状態に属している．ここで $E^{(1)}, E^{(1)\prime}$ は問題1の補正 (1) の二つの値である．時間因子の導入によって，時間に依存する波動関数に変換すると次のようになる：

$$\Psi_1=\frac{\exp(-iEt/\hbar)}{c_1c_2'-c_1'c_2}\left[c_2'\psi\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E^{(1)}t\right)-c_2\psi'\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E^{(1)\prime}t\right)\right]$$

(時刻 $t=0$ には $\Psi_1=\psi_1$)．最後にふたたび ψ, ψ' を ψ_1, ψ_2 であらわせば，時間に依存する係数をもつ ψ_1, ψ_2 の線形結合の形の Ψ_1 が得られる．ψ_2 にかかる係数の絶対値の自乗が求める遷移確率 w_{12} となる．問題1の (1) と (2) を用いて計算をすると

$$w_{12}=2\frac{|V_{12}|^2}{(\hbar\omega^{(1)})^2}[1-\cos\omega^{(1)}t]$$

となる．この確率は振動数 $\omega^{(1)}$ で周期的に振動していることがわかる．この周期にくらべて短い時間では，角括弧の中の表式ならびに確率 w_{21} は t^2 に比例する：

$$w_{21}=\frac{1}{\hbar^2}|V_{12}|^2t^2.$$

次節で説明する方法を用いれば，この式は非常に簡単に (方程式 (40.4) を用いて) 求めることができる．

§ 40. 時間に依存する摂動

時間にあらわに依存する摂動の研究に移ろう．この場合にはエネルギー固有値に対する補正をうんぬんすることは一般に不可能である．なぜならば (摂動を含む演算子 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}(t)$ のように) 時間に依存するハミルトニアンがあればエネルギーは一般には保存せず，したがって定常状態は存在しないからであ

る．そこで問題は非摂動系の定常状態の波動関数を用いて波動関数を近似的に計算することである．

この目的のために線形微分方程式の解法としてよく知られた定数変化の方法に相当する方法を適用しよう（P. A. M. Dirac, 1926）．$\Psi_k^{(0)}$ を非摂動系の定常状態の（時間因子を含めた）波動関数としよう．すると非摂動波動方程式の任意の解は和 $\Psi=\sum_k a_k\Psi_k^{(0)}$ の形に書くことができる．そこで摂動を含む方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=(\hat{H}_0+\hat{V})\Psi \tag{40.1}$$

の解を和

$$\Psi=\sum_k a_k(t)\Psi_k^{(0)} \tag{40.2}$$

の形に求めよう．ここで展開係数は時間の関数である．(40.2) を (40.1) に代入し，関数 $\Psi_k^{(0)}$ が方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_k^{(0)}}{\partial t}=\hat{H}_0\Psi_k^{(0)}$$

を満たすことを思い出せば次式が得られる：

$$i\hbar\sum_k\Psi_k^{(0)}\frac{da_k}{dt}=\sum_k a_k\hat{V}\Psi_k^{(0)}.$$

この方程式の両辺に左から $\Psi_m^{(0)*}$ を掛けて積分すれば

$$i\hbar\frac{da_m}{dt}=\sum_k V_{mk}(t)a_k \tag{40.3}$$

となる．ここで

$$V_{mk}(t)=\int\Psi_m^{(0)*}\hat{V}\Psi_k^{(0)}dq=V_{mk}e^{i\omega_{mk}t},\quad \omega_{mk}=\frac{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}{\hbar}$$

は時間因子を含んだ摂動の行列要素である（V があらわに時間に依存する量であれば，V_{mk} もまた時間の関数となることに注意しなければならない）．

非摂動波動関数として n 番目の定常状態の波動関数を選ぼう．これは (40.2) の係数の値を $a_n^{(0)}=1,\ a_k^{(0)}=0\ (k\neq n)$ ととることに対応している．1次近似を求めるために a_k を $a_k=a_k^{(0)}+a_k^{(1)}$ の形に書く．また（すでに小さな量 V_{mk} を含んでいる）方程式 (40.3) の右辺では $a_k=a_k^{(0)}$ と置こう．そうすると

$$i\hbar\frac{da_k^{(1)}}{dt}=V_{kn}(t) \tag{40.4}$$

が得られる．

どの非摂動関数に対して計算された補正であるかを示すために，係数 a_k に第2の添字をつけて次のように書こう：

$$\Psi_n=\sum_k a_{kn}(t)\Psi_k^{(0)}.$$

これに対応して方程式（40.4）の積分結果は次の形に書かれる：

$$a_{kn}^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}\int V_{kn}(t)dt=-\frac{i}{\hbar}\int V_{kn}e^{i\omega_{kn}t}dt. \tag{40.5}$$

これから1次近似の波動関数が決められる．

重要な場合の一つである時間について周期的な次のような形をした摂動をさらに詳しく考察しよう：

$$\hat{V}=\hat{F}e^{-i\omega t}+\hat{G}e^{i\omega t}. \tag{40.6}$$

ここで $\hat{F}$ と $\hat{G}$ は時間に依存しない演算子である．$\hat{V}$ のエルミート性のために，

$$\hat{F}e^{-i\omega t}+\hat{G}e^{i\omega t}=\hat{F}^{+}e^{i\omega t}+\hat{G}^{+}e^{-i\omega t}$$

でなければならない．これから $\hat{G}=\hat{F}^{+}$，すなわち

$$G_{nm}=F_{mn}^{*} \tag{40.7}$$

が得られる．この関係を用いれば

$$V_{kn}(t)=V_{kn}e^{i\omega_{kn}t}=F_{kn}e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}+F_{nk}^{*}e^{i(\omega_{kn}+\omega)t} \tag{40.8}$$

となる．

（40.5）の中にこれを代入して積分すれば，波動関数の展開係数に対する次の式が得られる：

$$a_{kn}^{(1)}=-\frac{F_{kn}e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)}-\frac{F_{nk}^{*}e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)}. \tag{40.9}$$

この式が適用できるのは分母がどちらもゼロにならない場合である[1)]；すなわち（n を与えたとき）すべての k について

$$E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\neq\pm\hbar\omega \tag{40.10}$$

の場合である．

摂動をうけた波動関数によって定義される任意の量 f の行列要素の表式を求めておくことは，一連の応用のために有用である．

1）より正確には，量 $a_{kn}^{(1)}$ が1にくらべて小さいという条件が成立しなくなるほど分母が小さくない場合である．

1次近似では

$$f_{nm}(t)=f_{nm}^{(0)}(t)+f_{nm}^{(1)}(t)$$

となる．ここで

$$f_{nm}^{(0)}(t)=\int\Psi_n^{(0)*}\hat{f}\Psi_m^{(0)}dq=f_{nm}^{(0)}e^{i\omega_{nm}t},$$

$$f_{nm}^{(1)}(t)=\int(\Psi_n^{(0)*}\hat{f}\Psi_m^{(1)}+\Psi_n^{(1)*}\hat{f}\Psi_m^{(0)})dq.$$

である．これに

$$\Psi_n^{(1)}=\sum_k a_{kn}^{(1)}\Psi_k^{(0)}$$

を代入し，(40.9) 式で定義される $a_{kn}^{(1)}$ を用いれば，容易に求める表式が得られて

$$f_{nm}^{(1)}(t)=-e^{i\omega_{nm}t}\sum_k\left\{\left[\frac{f_{nk}^{(0)}F_{km}}{\hbar(\omega_{km}-\omega)}+\frac{f_{km}^{(0)}F_{nk}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)}\right]e^{-i\omega t}+\left[\frac{f_{nk}^{(0)}F_{mk}^*}{\hbar(\omega_{km}+\omega)}+\frac{f_{km}^{(0)}F_{kn}^*}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)}\right]e^{i\omega t}\right\} \tag{40.11}$$

となる．この公式が適用できるのはいずれの項も大きくならない場合，すなわちすべての振動数 ω_{kn}, ω_{km} があまり ω に近づかない場合である．$\omega=0$ の場合にはこれは公式 (38.12) に戻ってしまう．

この節に書いたすべての公式の中では，非摂動エネルギー準位には離散スペクトルだけがあると仮定してきた．しかし（離散スペクトルに対する摂動を問題とする限り）これらを連続スペクトルが共存する場合へ一般化することはただちにできる．それには離散スペクトルについての和に，連続スペクトルについての積分をつけ加えさえすればよい．このときエネルギー $E_k^{(0)}$ が離散スペクトルだけでなく連続スペクトルを含めたすべての値をとっても，式 (40.9)，(40.11) の分母の $\omega_{kn}\pm\omega$ がゼロにならないことが必要である．よくあるように，もしも連続スペクトルがすべての離散スペクトルより上にあれば，条件 (40.10) の他にたとえば次の条件を加えなければならない：

$$E_{\min}^{(0)}-E_n^{(0)}>\hbar\omega. \tag{40.12}$$

ここで $E_{\min}^{(0)}$ は連続スペクトルの最低準位のエネルギーである．

問　　題

$E_m^{(0)}-E_n^{(0)}=\hbar(\omega+\varepsilon)$ (ε は微小量) を満足する振動数 ω をもつ ((40.6) の形をした)

周期的摂動が存在する場合のシュレーディンガー方程式の n 番目および m 番目の解の変化を求めよ.

解 (40.9) で与えられる係数 $a_{mn}^{(1)}$ が大きくなるので，この節の本文中で展開した方法は適用できない. そこで再び (40.8) の $V_{mk}(t)$ をもった正確な方程式 (40.3) から出発しよう. 明らかにもっとも重要な効果を生むのは，方程式 (40.3) の右辺の和の中の時間依存性が $\omega_{mn}-\omega$ なる低い振動数によって与えられる項である. そこで残りの項を全部落としてしまうと，次のような二つの方程式が得られる：

$$i\hbar\frac{da_m}{dt}=F_{mn}e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}a_n=F_{mn}e^{i\varepsilon t}a_n,$$

$$i\hbar\frac{da_n}{dt}=F_{mn}^*e^{-i\varepsilon t}a_m.$$

ここで

$$a_ne^{i\varepsilon t}=b_n$$

と置くと方程式

$$i\hbar\dot{a}_m=F_{mn}b_n,\qquad i\hbar(\dot{b}_n-i\varepsilon b_n)=F_{mn}^*a_m$$

が得られる. この２式から a_m を消去すれば，次のようになる：

$$\ddot{b}_n-i\varepsilon\dot{b}_n+\frac{1}{\hbar^2}|F_{mn}|^2b_n=0.$$

この方程式の二つの独立な解として

$$a_n=Ae^{i\alpha_1t},\qquad a_m=-A\frac{\hbar\alpha_1}{F_{mn}^*}e^{i\alpha_2t},\tag{1}$$

および

$$a_n=Be^{-i\alpha_2t},\qquad a_m=B\frac{\hbar\alpha_2}{F_{mn}^*}e^{-i\alpha_1t}\tag{2}$$

をとることができる. ここで A, B は（規格化条件から決められるべき）定数であり，また次の記号を導入した：

$$\alpha_1=-\frac{\varepsilon}{2}+\Omega,\quad \alpha_2=\frac{\varepsilon}{2}+\Omega,\quad \Omega=\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4}+|\eta|^2},\quad \eta=\frac{F_{mn}}{\hbar}.$$

このように，摂動の影響をうけて関数 $\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}$ は (1) あるいは (2) のような a_n と a_m をもった関数 $a_n\Psi_n^{(0)}+a_m\Psi_m^{(0)}$ に移行する.

はじめの時刻 ($t=0$) に系は状態 $\Psi_m^{(0)}$ にあったとしよう. それ以後の時刻における系の状態は，われわれの求めた２関数の次のような線形結合によって決められる：

$$\Psi=\left(e^{i\varepsilon t/2}\cos\Omega t-\frac{i\varepsilon}{2\Omega}e^{i\varepsilon t/2}\sin\Omega t\right)\Psi_m^{(0)}-\frac{i\eta^*}{\hbar\Omega}e^{-i\varepsilon t/2}\sin\Omega t\cdot\Psi_n^{(0)}.\tag{3}$$

これは $t=0$ で $\Psi_m^{(0)}$ となる. $\Psi_n^{(0)}$ にかかる係数の絶対値の自乗は

$$\frac{|\eta|^2}{2\Omega^2}(1-\cos 2\Omega t)\tag{4}$$

に等しい. これは系が時刻 t に状態 $\Psi_n^{(0)}$ にある確率を定める. これは周期 2Ω の周期関

数で，0 から $|\eta|^2/\Omega^2$ までの範囲を変化することがわかる．

$\varepsilon=0$（純共鳴）の場合には，確率 (4) は

$$\frac{1}{2}(1-\cos 2|\eta|t)$$

になる．これは 0 と 1 のあいだを周期的に変化する．いいかえると系は状態 $\Psi_m^{(0)}$ から状態 $\Psi_n^{(0)}$ へと周期的に遷移する．

§ 41. 有限時間だけ働く摂動による遷移

摂動 $V(t)$ はある有限時間だけ作用する（あるいは同じことだが $t\to\pm\infty$ となると $V(t)$ が十分はやく減衰する）と仮定しよう．摂動がはじめに加わるまでは（あるいは $t\to-\infty$ の極限では），系は（離散スペクトルの）n 番目の定常状態にあったとしよう．それ以後の任意の時刻における系の状態は関数

$$\Psi=\sum_k a_{kn}\Psi_k^{(0)}$$

によって決められるであろう．1 次近似でこの係数は

$$a_{kn}=a_{kn}^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}V_{kn}e^{i\omega_{kn}t}dt \quad (k\neq n),$$
$$a_{nn}=1+a_{nn}^{(1)}=1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}V_{nn}dt \tag{41.1}$$

となる．これは $t\to-\infty$ のときすべての $a_{kn}^{(1)}$ がゼロとなるように式 (40.5) の積分範囲を選んだものである．摂動の作用時間が過ぎると（あるいは $t\to\infty$ の極限では），係数 a_{kn} は一定値 $a_{kn}(\infty)$ をとり，系は関数

$$\Psi=\sum_k a_{kn}(\infty)\Psi_k^{(0)}$$

の状態になるであろう．この関数はふたたび非摂動波動方程式を満たすが，もとの波動関数 $\Psi_n^{(0)}$ とは異なっている．一般則によれば，係数 $a_{kn}(\infty)$ の絶対値の自乗は系がエネルギー $E_k^{(0)}$ をもつ確率，すなわち k 番目の定常状態にある確率を与える．

このように摂動の影響によって系は最初の定常状態から別の任意の定常状態へ移ることができる．最初の（i 番目の）定常状態から最終の（f 番目）の定常状態への遷移確率は

$$w_{fi}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}dt\right|^2 \tag{41.2}$$

に等しい[1]．

つぎに，いったん生じたらその後は無限にいつまでも働きつづける摂動（もちろん全時間を通じてその大きさは小さい）を考察しよう．いいかえれば $V(t)$ は $t\to-\infty$ でゼロとなるが，$t\to\infty$ ではゼロでない有限の極限値をとることになる．この場合には，公式（41.2）はその中の積分が発散するのですぐには適用できない．しかし，この発散は物理的に見れば重大なことではなく，容易に避けることができる．そのために部分積分を行なって次のように書こう：

$$a_{fi}=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}dt=-\frac{V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}}\bigg|_{-\infty}^{t}+\int_{-\infty}^{t}\frac{\partial V_{fi}}{\partial t}\frac{e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}}dt.$$

第1項の値は積分の下端でゼロとなる．また上端では公式（38.8）の中の展開係数と形式的に一致する（余分な周期因子 $e^{i\omega_{fi}t}$ がついているのは，§38 の c_{fi} が時間に依存しない関数 ψ の展開係数であったのに，この a_{fi} の方は全波動関数 Ψ の展開係数であるため）．それゆえ $t\to\infty$ におけるこの極限値は，単に摂動の《定数部分》$V(+\infty)$ の影響によるもとの波動関数 $\Psi_i^{(0)}$ の変化を定めるものであって，他の状態への遷移とは無関係である．遷移確率の方は第2項の絶対値の自乗から求められて

$$w_{fi}=\frac{1}{\hbar^2\omega_{fi}^2}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial V_{fi}}{\partial t}e^{i\omega_{fi}t}dt\right|^2 \qquad (41.3)$$

に等しい．

得られたこれらの公式は離散スペクトルの状態から連続スペクトルの状態へ遷移が行なわれる場合にも成り立つ．ただこの場合違うのは，与えられた（i 番目の）状態から量 ν_f の値が ν_f から $\nu_f+d\nu_f$ までの範囲にある状態（§38の終り参照）への遷移確率を問題とする点である．したがってたとえば公式（41.2）は次の形に書かなければならない：

$$dw_{fi}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}dt\right|^2 d\nu_f. \qquad (41.4)$$

もしも摂動 $V(t)$ が $\sim 1/\omega_{fi}$ ぐらいの時間にわずかしか変化しなければ，（41.2）あるいは（41.3）の積分の値は非常に小さくなる．加える摂動の変化をでき

1）記号の統一のために，以後（遷移確率を論ずる場合には），始状態と終状態をそれぞれ添字 i と f であらわすことにしよう．しかも，遷移確率に添字を書きこむ場合は，ちょうど，行列要素につける添字の順序と同じように fi という順序にしよう．

る限りおそくした極限では，エネルギーの変化を伴う（すなわちゼロでない振動数 ω_{fi} をもつ）遷移はすべてその確率がゼロになる．したがって加えられた摂動の変化が十分にゆっくりしていれば（**断熱的**であれば），非縮退の定常状態にある系はその同じ状態を保ち続ける（§53 も参照）．

これと逆の極限であるきわめて急激に**突然に**摂動が加えられる場合には，微係数 $\partial V_{fi}/\partial t$ は《印加の瞬間》に無限大となる．このときには，$\dfrac{\partial V_{fi}}{\partial t}e^{i\omega_{fi}t}$ の積分の中で比較的ゆっくりと変化する因子 $e^{i\omega_{fi}t}$ をその瞬間の値にとって積分記号の外に出すことができる．そうすれば積分はすぐにできて

$$w_{fi}=\frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2} \tag{41.5}$$

が得られる．

突然に加えられる摂動であればそれが小さくない場合でも遷移確率を求めることができる．

系がもとのハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有関数の一つである $\psi_n^{(0)}$ で記述される状態にあったとしよう．もしもハミルトニアンの変化が《突然に》（すなわち，与えられた状態 i から他の状態への遷移の周期 $1/\omega_{fi}$ にくらべて短い時間内に）行なわれるならば，系の波動関数は変化する《暇がなく》，摂動前と同じ形を保つ．しかしそれはもはや新しいハミルトニアン $\hat{H}$ の固有関数ではない．すなわち $\psi_n^{(0)}$ は定常状態ではない．系が新しい定常状態のうちのどれかに遷移する確率 w_{fi} は，量子力学の一般規則にしたがって，ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有関数 ψ_f による関数 $\psi_i^{(0)}$ の展開係数によって決められる：

$$w_{fi}=\left|\int\psi_i^{(0)}\psi_f^*dq\right|^2. \tag{41.6}$$

ハミルトニアンの変化 $V=\hat{H}-\hat{H}_0$ が小さい場合に，この一般式がどのようにして公式（41.5）に移行するかを示そう．方程式

$$\hat{H}_0\psi_i^{(0)}=E_i^{(0)}\psi_i^{(0)},\qquad \hat{H}^*\psi_f^*=E_f\psi_f^*$$

にそれぞれ ψ_f^* と $\psi_i^{(0)}$ を掛け，q について積分し，ついで一方から他方を辺々相引き，さらに演算子 $\hat{H}$ の自己共役性を利用すれば次の式が得られる：

$$(E_f-E_i^{(0)})\int\psi_f^*\psi_i^{(0)}dq=\int\psi_f^*\hat{V}\psi_i^{(0)}dq.$$

もしも摂動 $\hat{V}$ が小さければ，1次近似として E_f をそれに近い非摂動準位

$E_f^{(0)}$ で置きかえ，また（この等式の右辺の）波動関数 ψ_f をこれに対応する関数 $\psi_f^{(0)}$ で置きかえることができる．そうすれば

$$\int\psi_f^*\psi_i^{(0)}dq=\frac{1}{\hbar\omega_{fi}}\psi_f^{(0)*}\hat{V}\psi_i^{(0)}dq.$$

が得られ，公式（41.6）が（41.5）に移行することとなる．

問　　題

1. 基底状態にある帯電した振動子に一様な電場が突然かかったとする．この摂動の影響によって振動子が励起状態に遷移する確率を求めよ．

解（働く力が F である）一様な場の中の振動子のポテンシャル・エネルギーは

$$U(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2-Fx=\frac{m\omega^2}{2}(x-x_0)^2+\text{const}$$

である（ここで $x_0=F/m\omega^2$）．すなわち，ふたたび（平衡位置のずれた）純粋の振動子型になる．それゆえ摂動をうけた振動子の定常状態の波動関数は，$\psi_k(x)$ を振動子の関数（23.12）としたとき $\psi_k(x-x_0)$ となる．はじめの波動関数は（23.13）の $\psi_0(x)$ である．この関数とエルミート多項式をあらわす式（23.11）を用いれば

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^{(0)}\psi_k dx=\frac{(-1)^k}{\sqrt{2^k\pi k!}}e^{-\xi_0^2/2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi\xi_0}\frac{d^k}{d\xi^k}e^{-\xi^2+2\xi\xi_0}d\xi$$

が得られる．ここで記号 $\xi_0=x_0\sqrt{m\omega/\hbar}$ を導入した．ここにあらわれた積分は部分積分を k 回行なうことによって次の積分になる：

$$\xi_0^k\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\xi^2+\xi\xi_0)d\xi=\xi_0^k\sqrt{\pi}\exp(\xi_0^2/4).$$

結局求める遷移確率（41.6）として

$$w_{k0}=\frac{\bar{k}^k}{k!}e^{-\bar{k}},\qquad \bar{k}=\frac{\xi_0^2}{2}=\frac{F^2}{2m\hbar\omega^3}$$

が得られる．これを数 k の関数として見ると，平均値 $\bar{k}$ をもつポアッソン分布になっている．

摂動論が適用できるのは，$\bar{k}\ll1$ となるような F の小さな場合に相当する．このときは励起の確率は小さく，k が増えると急速に減少する．そのうち最大のものは $w_{10}\cong\bar{k}$ である．

逆に F の大きい（$\bar{k}\gg1$）場合には，振動子の励起が圧倒的確率で起こり，基底状態に振動子が残る確率は $w_{00}=e^{-\bar{k}}$ となる．

2. 基底状態にある原子核が外から衝撃をうけ，その結果速度 v を得たとする．衝撃の継続時間 τ は電子の周期にくらべても，また a を原子の大きさとしたときの a/v に比べても短いと仮定する．このような《激震》による原子の励起の確率を求めよ（ア・ベ・ミグダル A. Г. Мигдал, 1939）.

解　衝撃後の核とともに運動する座標系 K' に移ろう．条件 $\tau \ll a/v$ があるので，衝撃の間には核はほとんど変位しないと考えることができる．したがって摂動の直後には K' 系における電子の座標とはじめの K 系における電子の座標とは一致している．はじめの波動関数は K' 系では

$$\psi_0' = \psi_0 \exp\left(-i\boldsymbol{q}\sum_a \boldsymbol{r}_a\right), \qquad \boldsymbol{q} = \frac{m\boldsymbol{v}}{\hbar}$$

となる．ここで ψ_0 は核が静止しているときの基底状態の波動関数である．また指数中の和は原子中の Z 個の電子全部について行なう（§ 15 の問題 2 参照）．このとき求める k 番目の励起状態への遷移確率は，(41.6) に従い次式で与えられる：

$$w_{k0} = \left|\langle k|\exp\left(-i\boldsymbol{q}\sum_a \boldsymbol{r}_a\right)|0\rangle\right|^2.$$

とくに $qa \ll 1$ であれば，積分記号の中の指数因子を展開し，また $\psi_k^*\psi_0$ の積分が関数 ψ_0 と ψ_k の直交性によってゼロになることに注意して

$$w_{k0} = \left|\langle k|\boldsymbol{q}\sum_a \boldsymbol{r}_a|0\rangle\right|^2$$

を得る．

3.　外部から《激震》があった場合の水素原子の励起とイオン化の全確率を求めよ（前問参照）．

解　求める確率は次のような差として計算される：

$$1 - w_{00} = 1 - \left|\int \psi_0^2 e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}} dV\right|^2.$$

ここで w_{00} は原子が基底状態に残る確率である（$\psi_0 = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$ は水素原子の基底状態の波動関数，a はボーア半径である）．積分を計算すれば次式が得られる：

$$1 - w_{00} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4}q^2a^2\right)^4}.$$

$qa \ll 1$ の極限では，この確率は $1 - w_{00} \cong q^2a^2$ のようにゼロに近づき，$qa \gg 1$ の極限では $1 - w_{00} \cong 1 - (2/qa)^8$ のように 1 に近づく．

4.　原子核の β 崩壊に伴って大きな原子番号 Z をもつ原子の K 殻から電子放射が起こる確率を求めよ．β 粒子の速度は K 電子の速度にくらべて大きいと仮定する（ア・ベ・ミグダル А. Б. Мигдал，イェ・エリ・フェインベルク Е. Л. Фейнберг，1941）．

解[1]　示された条件の下では，β 粒子が K 殻を通過する時間は電子の回転周期にくらべて短い．それゆえ核電荷の変化を瞬間的と考えることができる．このとき摂動となるのは，核電荷の（1 対 Z の）小さな変化に伴う核の場の変化 $V = 1/r$ である．式 (41.5) によれば，エネルギー $E_0 = -Z^2/2$ [2] をもつ K 殻の二つの電子のうちの一つが，幅 $dE = kdk$ の間にあるエネルギー $E = k^2/2$ をもつ連続スペクトルの状態へ遷移する確率は

1)　問題 4 と 5 では原子単位を用いている．

2)　ここおよび以下では K 電子の状態が水素型であることを用いている（§ 74 参照）．

$$dw=2\frac{4|V_{0k}|^2}{(k^2+Z^2)^2}dk$$

となる．

行列要素 V_{0k} を求める積分では核から（$1/Z$ 程度の）近距離の領域が重要である．そこでは連続スペクトルの状態の波動関数として同じく水素型の表式を用いることができる．電子の最終状態がもつ角運動量は（最初の状態の角運動量と同じく）$l=0$ でなければならない．§36 で得た関数 R_{10} と $k/2\pi$ 目盛上で規格化されている関数 R_{k0} および数学的補遺の公式（f.3）を用いると[1]

$$\left(\frac{1}{r}\right)_{0k}=\frac{4\sqrt{2\pi k}}{\sqrt{1-e^{-2\pi Z/k}}}\frac{(1+ik/Z)^{iZ/k}(1-ik/Z)^{-iZ/k}}{(1+k^2/Z^2)}$$

が得られる．また

$$|(1+i\alpha)^{i/\alpha}|^2=\exp\left(-2\frac{\tan^{-1}\alpha}{\alpha}\right)$$

であるから，結局

$$dw=\frac{2^7}{Z^4(1+k^2/Z^2)^4}f\left(\frac{k}{Z}\right)kdk$$

となる．ここで次の記号を導入した：

$$f(\alpha)=\frac{1}{1-e^{-2\pi/\alpha}}\exp\left(-4\frac{\tan^{-1}\alpha}{\alpha}\right).$$

関数 $f(\alpha)$ の極限値は

$$\alpha\ll 1 \text{ のとき } f=e^{-4},\qquad \alpha\gg 1 \text{ のとき } f=\frac{\alpha}{2\pi}$$

である．

K 殻のイオン化の全確率は，放射電子の全エネルギーにわたり dw を積分すれば得られる．数値計算から $w=0.65\cdot Z^{-2}$ が得られる．

5. 原子核の α 崩壊に伴って大きな Z をもつ原子の K 殻から電子放射が起こる確率を求めよ．α 粒子の速度は K 電子の速度にくらべて小さいが，それが核から脱出する時間は電子の回転周期にくらべて短いものとする（ア・ベ・ミグダル A. Б. Мигдал, 1941; J. Levinger, 1953).

解 α 粒子の放射が終われば電子に働く摂動は断熱的性格をもってしまう．したがって求める効果は摂動の《印加の瞬間》に近い断熱性の破れている時間内にほとんど決まってしまう．この時間には，核から跳び出して自由に動きはじめた α 粒子はまだ K 軌道の半径よりも内側にとどまっている．このとき原子のイオン化をひき起こす摂動 V として働くのは，核と α 粒子による合成場の純粋クーロン場 Z/r からのはずれである．互いに距離 vt だけ離れた（v は核と α 粒子の相対速度）原子量 4 と $A-4$，電荷 2 と $Z-2$ の 2 粒子の双極子モーメントは

1) この計算ではクーロン単位を用いるのが便利である．そのあと最終結果で原子単位に戻せばよい．

$$\frac{2(A-4)-(Z-2)4}{A}vt=\frac{2(A-2Z)}{A}vt$$

である．したがって核と α 粒子の場の双極子項は

$$V=\frac{2(A-2Z)}{A}vt\frac{z}{r^3}$$

である[1]．ここで z 軸は速度 $\boldsymbol{v}$ の方向にとってある．この摂動の行列要素は z の行列要素に還元できる．すなわち電子の運動方程式 $\ddot{z}=-Zz/r^3$ の行列要素をとれば

$$\left(\frac{z}{r^3}\right)_{0k}=\frac{(E-E_0)^2}{Z}z_{0k}$$

が得られる．

われわれの求めている K 殻の二つの電子のうちの一つが遷移する確率は，式 (41.2) によって

$$dw=2\left|\int_0^\infty V_{0k}e^{i(E_0-E)t}dt\right|^2dk=\frac{8(A-2Z)^2v^2}{A^2Z^2}|z_{0k}|^2\frac{dk}{2\pi}$$

に等しい（積分を計算するために，被積分式の中によぶんな収束因子 $e^{-\lambda t}$ $(\lambda>0)$ を導入し，あとで得られた結果の中で $\lambda\to 0$ と置く）．$z=r\cos\theta$ の行列要素を計算するためには，はじめの状態の軌道角運動量が $l=0$ なので，$\cos\theta$ がゼロでない行列要素をもつのは $l=1$ の状態への遷移だけであることに注意する；このとき

$$|(\cos\theta)_{01}|^2=(\cos\theta)_{00}=\frac{1}{3}\quad したがって\quad |z_{0k}|^2=\frac{1}{3}|r_{0k}|^2$$

となる．r_{0k} を動径関数 R_{00} と R_{k1} を用いて計算すれば，結局次式が得られる：

$$dw=\frac{2^{11}(A-2Z)^2v^2}{3A^2Z^6\left(1+\frac{k^2}{Z^2}\right)^5}f\left(\frac{k}{Z}\right)kdk$$

（関数 f は問題 4 で定義されている）．

§ 42. 周期的摂動による遷移

周期的摂動の作用によって生ずる連続スペクトルの状態への遷移の確率について得られる結果は，これまでとは性質を異にしている．系ははじめのある時刻 $t=0$ に離散スペクトルの i 番目の定常状態にあると仮定しよう．周期的摂動の周期 ω は

$$\hbar\omega>E_{\min}-E_i^{(0)}\tag{42.1}$$

であると仮定する．ここで $E_{\min}$ は連続スペクトルがそこから始まるエネルギーの値である．

§ 40 の結果からすでに明らかなように，主要な役割を演ずるのはエネルギー

1) もしも差 $A-2Z$ が小さければ，次の 2 次の項も考慮することが必要となる．

の値 E_f が《共鳴》エネルギー $E_i^{(0)}+\hbar\omega$ のごく近傍にある状態，すなわち差 $\omega_{fi}-\omega$ の小さい状態である．この理由によって，摂動の行列要素（40.8）の中では（振動数 $\omega_{fi}-\omega$ がゼロに近い）第1項だけを考えれば十分である．この項を（40.5）に代入して積分すれば

$$a_{fi}=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{fi}(t)dt=-F_{fi}\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\hbar(\omega_{fi}-\omega)} \tag{42.2}$$

が得られる． 積分の下端は課せられた初期条件に一致して $t=0$ で $a_{fi}=0$ となるように選んである．

これから a_{fi} の絶対値の自乗が求められて

$$|a_{fi}|^2=|F_{fi}|^2\frac{4\sin^2\dfrac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\hbar^2(\omega_{fi}-\omega)^2} \tag{42.3}$$

となる．ここにあらわれた関数は t が大きいとき t に比例するとしてよいことが容易にわかる．

このためには，次の公式があることに注意する：

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2\alpha t}{\pi t\alpha^2}=\delta(\alpha). \tag{42.4}$$

実際，$\alpha\neq 0$ の場合には上記の極限はゼロに等しく，$\alpha=0$ の場合には $\dfrac{\sin^2\alpha t}{t\alpha^2}=t$ であるから極限は無限大になる．また α について $-\infty$ から $+\infty$ の範囲で積分を行なうと（$\alpha t=\xi$ と置きかえる）

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2\alpha t}{t\alpha^2}d\alpha=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2\xi}{\xi^2}d\xi=1$$

となる．したがって等式（42.4）の左辺にある関数は，δ-関数を定義するすべての要求を実際に満たしている．

この公式に従えば，t が大きいとき次のように書くことができる：

$$|a_{fi}|^2=\frac{1}{\hbar^2}|F_{fi}|^2\pi t\delta\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right).$$

あるいは $\hbar\omega_{fi}=E_f-E_i^{(0)}$ と置き，$\delta(ax)=\delta(x)/a$ を使うと

$$|a_{fi}|^2=\frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2\delta(E_f-E_i^{(0)}-\hbar\omega)t$$

となる．

$|a_{fi}|^2d\nu_f$ は，はじめの状態から与えられた区間 $d\nu_f$ の中にある状態への遷

移確率である．t が大きいとき，この式は時刻 $t=0$ からの経過時間に比例することがわかる．単位時間当たりの遷移確率 dw_{fi} は

$$dw_{fi}=\frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2\delta(E_f-E_i^{(0)}-\hbar\omega)d\nu_f \tag{42.5}$$

に等しい[1]．

予想されたように，これはエネルギー $E_f=E_i^{(0)}+\hbar\omega$ をもつ状態へ遷移する場合に限りゼロでない．もしも連続スペクトルのエネルギー準位が縮退しておらず，ν_f としてエネルギーの値だけを考えることができれば，状態の全《間隔》$d\nu_f$ はエネルギー $E=E_i^{(0)}+\hbar\omega$ をもつただ1個の状態に還元されて，この状態への遷移確率は

$$w_{Ei}=\frac{2\pi}{\hbar}|F_{Ei}|^2 \tag{42.6}$$

となる．

公式 (42.5) を次のように別な手法で導いてみるのも，方法論として教訓的である．このやり方では，周期的な摂動を時刻 $t=0$ から不連続的に加えるのではなく，$t=-\infty$ からゆっくりと，すなわち，正の定数 λ をもって指数関数則 $e^{\lambda t}$ にしたがって成長させ，しかるのち，この定数をゼロにもっていくのである（**断熱的印加**）．したがって，この場合には，時刻 $t=-\infty$ に初期条件 $a_{fi}=0$ が設定される．摂動の行列要素は次の形になる：

$$V_{fi}(t)=F_{fi}e^{i(\omega_{fi}-\omega)t+\lambda t}.$$

また，(42.2) に代って，次のように書かれる：

$$a_{fi}=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}V_{fi}(t)dt=-F_{fi}\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t+\lambda t}}{\hbar(\omega_{fi}-\omega-i\lambda)}. \tag{42.7}$$

これから

$$|a_{fi}|^2=\frac{1}{\hbar^2}|F_{fi}|^2\frac{e^{2\lambda t}}{(\omega_{fi}-\omega)^2+\lambda^2}$$

となる．単位時間あたりの遷移確率は微係数

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}|^2=2\lambda|a_{fi}|^2$$

によって決められる．ここで，(42.4) と同じ意味で成り立つ公式

1) 容易に証明されるように，われわれの省略した (40.8) の第2項を考慮すれば余分の式が得られるが，これを t で割ったものは $t\to+\infty$ ではゼロになってしまう．

$$\lim_{\lambda\to 0}\frac{\lambda}{\pi(\alpha^2+\lambda^2)}=\delta(\alpha) \tag{42.8}$$

が存在することに注意しよう．この公式を用い，$\lambda\to 0$ の極限に移行すれば，

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}|^2\longrightarrow\frac{2\pi}{\hbar^2}|F_{fi}|^2\delta(\omega_{fi}-\omega)$$

を得る．これでふたたび公式（42.5）へ戻った．

§ 43. 連続スペクトル内の遷移

摂動論のもっとも重要な応用の一つは，（時間に依存しない）定摂動の作用によって生ずる連続スペクトル内の遷移確率を計算することである．すでに述べたように，連続スペクトルの状態はほとんどいつも縮退している．したがってある与えられたエネルギー準位に属する非摂動波動関数の組を一定の方式で選ぶと，はじめの時刻に系がこれらのうちの一つの状態にあることを知って，同一エネルギーの他の状態への遷移確率を求めることが問題となる．最初の状態 i から ν_f と $\nu_f+d\nu_f$ の間の状態への遷移に対して（42.5）からただちに次式が得られる（$\omega=0$ と置き，記号も変えてある）：

$$dw_{fi}=\frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\delta(E_f-E_i)d\nu_f. \tag{43.1}$$

当然のことであるが，この式は $E_f=E_i$ の場合だけゼロでない．すなわち定摂動の下では，同じエネルギーをもつ状態の間にのみ遷移が起こる．連続スペクトルの状態からの遷移では，量 dw_{fi} を遷移確率とみなすことはすぐにはできないことに注意する必要がある．これは，それにふさわしい次元（1/秒）さえもっていない．式（43.1）は単位時間当たりの遷移数をあらわしているが，その次元は連続スペクトルの波動関数の規格化に用いた方法に依存している[1]．

摂動をうけた波動関数を計算しよう．これは摂動を受けはじめるまではもとの非摂動関数 $\psi_i^{(0)}$ と一致している．前節の終りに示した方法を実行することにして，摂動は指数関数則 $e^{\lambda t}$ $(\lambda\to 0)$ にしたがって断熱的に印加されると考えよう．公式（42.7）により（この中で $\omega=0$ と置き，記号も変える），次式が得ら

1）これから述べる理論で扱うことのできる現象のうちには，例えば，各種の衝突がある．この場合には，系ははじめとおわりの時刻には，一組の自由粒子である．また粒子間の相互作用が摂動の役割を果たしている．波動関数を適当に規格化しておけば，量（43.1）は衝突断面積になる（§126 参照）．

れる：

$$a_{fi}^{(1)}=V_{fi}\frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t+\lambda t\right\}}{E_i-E_f+i\lambda} \tag{43.2}$$

摂動をうけた波動関数は次の形をしている：

$$\Psi_i=\Psi_i^{(0)}+\int a_{fi}^{(1)}\Psi_f^{(0)}d\nu_f,$$

ここで，積分はすべての連続スペクトルについて行なう[1]．(43.2) をここに代入すると次式がえられる：

$$\Psi_i=\left[\psi_i^{(0)}+\int V_{fi}\psi_f^{(0)}\frac{d\nu_f}{E_i-E_f+i0}\right]\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_it\right). \tag{43.3}$$

$\lambda\to0$ の極限では，因子 $e^{\lambda t}$ は 1 で置きかえられる．分母の $+i0$ の項（これは正の量 λ をゼロに近づけた場合の $i\lambda$ の極限を表わす）は，変数 E_f についての積分のやり方を定義している．E_f の微分は（連続スペクトルの状態を指定する他の量の微分とともに）$d\nu_f$ の中に因子として含まれている．もしも $i\lambda$ の項がなければ，(43.3) の中の被積分関数は $E_f=E_i$ に極をもち，その近傍で積分は発散するであろう．$i\lambda$ の項は，この極を変数 E_f の複素上半面に移動させる．極限移行 $\lambda\to0$ をすると，極はふたたび実軸上にもどってくるが，積分路の方はこんどは極の下側を回るようになることを，われわれは知っている：



(43.4)

(43.3) の中の時間因子は，当然のことだが，この関数がはじめの非摂動関数と同じエネルギー E_i に属していることを示している．いいかえれば，関数

$$\psi_i=\psi_i^{(0)}+\int\frac{V_{fi}}{E_i-E_f+i0}\psi_f^{(0)}d\nu_f$$

はシュレーディンガー方程式

$$(\hat{H}_0+\hat{V})\psi_i=E_i\psi_i$$

を満足する．したがってこの式が公式 (38.8) に正確に対応する[2] ことも当然

1) もしも離散スペクトルも存在していれば，この公式および以下の公式の積分にこれに対応する離散スペクトルの状態についての和をつけ加えなければならない．

2) この公式から出発する場合の積分路のとり方は，遠方における ψ_i の漸近式が発散波のみを含み収束波を含まないという要請から決めることができる（§ 136 参照）．

である.

以上の計算は摂動論の1次近似に対応している. 2次近似を計算するのも困難ではない. このためには Ψ_i に対する次の近似の公式を導かなくてはならない. これは (《発散する》積分のとり扱い方を知ったいまでは) §38の方法を用いて容易に行なうことができる. 簡単な計算から次の公式が導かれる:

$$\Psi_i=\left\{\psi_i^{(0)}+\int\left[V_{fi}+\int\frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i-E_\nu+i0}d\nu\right]\frac{\psi_f^{(0)}d\nu_f}{E_i-E_f+i0}\right\}e^{-\frac{i}{\hbar}E_it}. \quad (43.5)$$

この式を公式 (43.3) とくらべれば, 対応する確率の公式 (正確には遷移数の公式) を (43.1) との類推からただちに書き下すことができる:

$$dw_{fi}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi}+\int\frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i-E_\nu+i0}d\nu\right|^2\delta(E_i-E_f)d\nu_f. \quad (43.6)$$

考察している遷移の行列要素 V_{fi} がゼロになることがたまたまあるかもしれない. そのようなときには, 1次近似の効果は一般に消えてしまい, (43.6) 式は

$$dw_{fi}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\int\frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i-E_\nu}d\nu\right|^2\delta(E_f-E_i)d\nu_f \quad (43.7)$$

となる (この公式を適用する場合, 点 $E_\nu=E_i$ は通常は被積分式の特異点ではない. それゆえ一般に dE_ν についての積分の仕方は重要ではなく, ただちにこれを実軸に沿って行なうことができる).

$V_{f\nu}$ と $V_{\nu i}$ がゼロでないような状態 ν のことを, 遷移 $i\to f$ に対する**中間状態**と普通呼んでいる. 直観的には, この遷移は二つの段階 $i\to\nu$ と $\nu\to f$ を踏んで起こるのだと, 言うことができる (しかし, おそらく, このような言い方を文字通りの意味にとってはいけないのだろう). 遷移 $i\to f$ が一つの中間状態だけでなく次々にいくつかの中間状態を介してはじめて可能になることがある. 公式 (43.7) はこのような場合にもただちに拡張できる. たとえば二つの中間状態が必要ならば, 次のようになる:

$$dw_{fi}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\int\frac{V_{f\nu'}V_{\nu'\nu}V_{\nu i}}{(E_i-E_{\nu'})(E_i-E_\nu)}d\nu d\nu'\right|^2\delta(E_f-E_i)d\nu_f. \quad (43.8)$$

最後に, (43.4) の形の径路に沿って行われる積分の数学的意味を明らかにするために, 次の公式を示しておこう:

$$\int\frac{f(x)dx}{x-a-i0}=\mathrm{P}\int\frac{f(x)dx}{x-a}+i\pi f(a), \quad (43.9)$$

ここで，積分は点 $x=a$ を含む実軸上の線分に沿って行われる．実際，半径 ρ の半円に沿って極 $x=a$ を迂回すると，全積分は実軸に沿った下限から $a-\rho$ までと $a+\rho$ から上限までの積分，および極における被積分式の留数（に $i\pi$ をかけたもの）の和に等しくなる．$\rho\to0$ の極限では，実軸に沿った積分は全線分に沿った主値の意味の積分となる（このことは，Pをつけた積分記号で示されている）．こうして（43.9）に到達する．この公式は，記号的に次のように書くこともできる：

$$\frac{1}{x-a-i0}=\mathrm{P}\frac{1}{x-a}+i\pi\delta(x-a). \qquad (43.10)$$

記号 P は，関数 $f(x)/(x-a)$ を積分する場合には，積分の主値をとるべきことを示している．

§ 44. エネルギーに対する不確定関係

弱く相互作用している2個の部分からなる系を考察しよう．ある時刻にこれらの部分が確定したエネルギー値をもっていることがわかったと仮定し，それをそれぞれ E および ε であらわそう．ある時間 $\varDelta t$ を経たのち，ふたたびエネルギーの測定を行なったとしよう．するとこれは一般に E, ε とは異なるある値 E', ε' を与える．測定の結果得られるであろう差 $E'+\varepsilon'-E-\varepsilon$ のもっとも確からしい値がどの程度の大きさになるかは容易に求められる．

公式（42.3）（で $\omega=0$ と置いたもの）によれば，時間に依存しない摂動の作用によって（時間 t の間に）系がエネルギー E の状態からエネルギー E' の状態へ遷移する確率は

$$\frac{\sin^2\dfrac{E'-E}{2\hbar}t}{(E'-E)^2}$$

に比例する．これからわかるように，差 $E'-E$ のもっとも確からしい値は $\hbar/t$ の程度である．

この結果をわれわれが考察している場合に適用すると（摂動に相当するのは系の部分間の相互作用である），次の関係が得られる：

$$|E+\varepsilon-E'-\varepsilon'|\varDelta t\sim\hbar. \qquad (44.1)$$

したがって時間 $\varDelta t$ が短いほど，観測されるエネルギーの変化は大きい．こ

の大きさの程度 $\hbar/\Delta t$ が摂動の大きさに依存しないことは重要である．関係式 (44.1) によって決められるエネルギーの変化は，系の二つの部分の間の相互作用がどんなに弱くても観測されるものである．この結果は純粋に量子力学的なもので，深い物理的意味をもっている．このことは量子力学では，エネルギー保存則は2回の測定によって $\hbar/\Delta t$ 程度の精度でしか確かめ得ないことを示している．ここで Δt は二つの測定の間の時間である．

(44.1) の関係のことをエネルギーに対する不確定関係とふつう呼んでいる．しかしこの意味は座標と運動量に対する不確定関係 $\Delta p\Delta x\sim\hbar$ の意味と本質的に異なっていることを強調する必要がある．後者では Δp と Δx は同時刻における運動量と座標の値の不確定性をあらわしている．これは一般にこの二つの量が同時に厳密な確定値をとり得ないことを示している．エネルギー E,ε の方はこれとは反対に与えられた各時刻に任意の精度で測定することができる．(44.1) の中の量 $(E+\varepsilon)-(E'+\varepsilon')$ は二つの異なる時刻におけるエネルギー $E+\varepsilon$ の二つの正確な測定値の差であって，ある決まった時刻におけるエネルギーの値の不確定性ではない．

もしも E をある系のエネルギー，また ε を《測定器》のエネルギーとみなせば，その間の相互作用エネルギーは $\hbar/\Delta t$ の精度でしかとり入れることができないということができよう．$\Delta E,\Delta\varepsilon,\cdots$ を対応する量の測定値の誤差としよう．ε,ε' が正確にわかっている ($\Delta\varepsilon=\Delta\varepsilon'=0$) ような好都合な場合には

$$\Delta(E-E')\sim\frac{\hbar}{\Delta t} \tag{44.2}$$

となる．

この関係から運動量の測定に関して重要な結論を導くことができる．粒子（事を明白にするため電子について述べる）の運動量の測定の過程には，電子と他のある（《測定》）粒子との衝突が含まれている．これはその運動量が衝突の前後に正確にわかると考えられる粒子のことである[1]．この衝突に運動量保存則を適用すれば，6個の未知数——衝突の前後における電子の運動量の成分——を含む3個の方程式（1個のベクトル方程式の3成分）が得られる．方

1) ここで行なう分析のためには，《測定》粒子のエネルギーをどのようにして知るかということは重要ではない．

程式の数を増やすために，電子と《測定》粒子との衝突を引き続き起こさせて，各衝突に運動量の保存則を適用することができる．しかしこうすれば未知数（衝突の間の電子の運動量）の数も増えてしまう．そして容易にわかるように，任意の衝突回数のとき未知数の数は方程式の数を3個上まわっている．したがって電子の運動量を測定するためには，運動量保存則の他にエネルギー保存則をさらに各衝突にもちこむ必要がある．しかしすでに説明したように，後者はせいぜい $\hbar/\Delta t$ の程度の精度でしか用いることができない．ここで Δt は問題にしている過程の初めから終わりまでの時間である．

以下の議論を簡単にするためには，《測定粒子》が理想的な平面反射鏡であって，鏡面に垂直な一つの運動量成分だけが関係してくるような理想化された思考実験を考えるのがよい．粒子の運動量 P を決定するために，運動量とエネルギーの保存則を書くと次の方程式になる：

$$p'+P'-p-P=0, \tag{44.3}$$

$$|\varepsilon'+E'-\varepsilon-E|\sim\frac{\hbar}{\Delta t} \tag{44.4}$$

（P, E は粒子の運動量とエネルギー，p, ε は鏡のそれ，ダッシュのない量とある量はそれぞれ衝突の前後のものである）．《測定粒子》に関する量 $p, p', \varepsilon, \varepsilon'$ は正確にわかっている，すなわちその誤差はゼロと見なすことができる．そうすれば，上記の方程式から残りの量の誤差として

$$\Delta P=\Delta P', \qquad \Delta E'-\Delta E\sim\frac{\hbar}{\Delta t}$$

が得られる．しかし v を（衝突前の）電子の速度としたとき，

$$\Delta E=\frac{\partial E}{\partial P}\Delta P=v\Delta P$$

であり，同様に

$$\Delta E'=v'\Delta P'=v'\Delta P$$

である．したがって次式が得られる：

$$(v_x'-v_x)\Delta P_x\sim\frac{\hbar}{\Delta t}. \tag{44.5}$$

ここで速度と運動量に添字 x をつけたのは，この関係が各成分について別々に成り立つことを強調するためである．

これが求める関係である．これは電子の運動量の（与えられた精度ΔP内の）測定は必然的にその速度（すなわち運動量そのもの）の変化と結びついていることを示している．この変化は測定の過程が短ければ短いほど大きくなる．速度の変化は$\Delta t \to \infty$の場合にのみいくらでも小さくすることができる．しかし長時間にわたる運動量の測定が意味をもちうるのは，自由粒子に対してだけである．ここに短い時間をおいて行なわれる運動量測定の非再現性と測定の《2面性》——物理量の測定された値と，測定の結果生じた値を区別することの必然性——という量子力学の特徴がとくに鮮明にあらわれている[1]．

この節のはじめのところで導いた摂動論に基づく結論には，別の観点からも到達することができる．それにはこれをある摂動の作用によって生ずる系の崩壊の問題へ適用すればよい．崩壊の可能性を完全に無視して計算した系のあるエネルギー準位をE_0としよう．τによってこの系の状態の**寿命**，すなわち単位時間あたりの崩壊の確率の逆数をあらわす．すると前と同様にして次の関係が得られる：

$$|E_0-E-\varepsilon| \sim \hbar/\tau. \tag{44.6}$$

ここでE, εは系が崩壊してできた二つの部分のエネルギーである．ところが系の崩壊前のエネルギーは和$E+\varepsilon$によって推定することができる．したがって得られたこの関係は，崩壊可能な**準定常**状態にある系のエネルギーは$\hbar/\tau$の精度でしか決定できないことを示している．この量は準位の**幅**Γとふつう呼ばれている．したがって

$$\Gamma \sim \hbar/\tau \tag{44.7}$$

となる．

§ 45. 摂動としてのポテンシャル・エネルギー

外場の中にある粒子の全ポテンシャル・エネルギーを摂動とみなすことのできる場合は，特別に考察するに値する．このときの非摂動シュレーディンガー方程式は，粒子の自由運動の方程式

1)（44.5）の関係およびエネルギーの不確定関係の物理的意味の解明はN.ボーアによってなされた（1928）．

$$\Delta\psi^{(0)}+k^2\psi^{(0)}=0, \qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}=\frac{p}{\hbar} \tag{45.1}$$

であって，これは平面波の解をもっている．自由運動のエネルギー・スペクトルは連続であるから，連続スペクトルの中の摂動論という特別な場合をとり扱わなければならない．この問題の解は一般公式を用いずに直接求める方が便利である．

波動関数の1次近似の補正 $\psi^{(1)}$ に対する方程式は

$$\Delta\psi^{(1)}+k^2\psi^{(1)}=\frac{2mU}{\hbar^2}\psi^{(0)} \tag{45.2}$$

となる（U はポテンシャル・エネルギー）．この方程式の解は電気力学でよく知られているように《遅延ポテンシャル》の形，すなわち次の形に書くことができる[1]：

$$\begin{gathered}\psi^{(1)}(x,y,z)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\psi^{(0)}U(x',y',z')e^{ikr}\frac{dV'}{r},\\ dV'=dx'dy'dz', \quad r^2=(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2.\end{gathered} \tag{45.3}$$

場 U を摂動とみなすことができるためには，どのような条件が満たされなければならないかを明らかにしよう．摂動論が適用できるための条件から $\psi^{(1)}\ll\psi^{(0)}$ が要請される．場がゼロと大きく異なる空間領域の大きさを a の程度としよう．粒子のエネルギーが十分に低くて，ak は1と同程度かあるいはそれより小さいことをはじめに仮定する．そうすれば（45.3）の被積分式中の因子 e^{ikr} は大きさの程度を評価する場合には重要ではなくなって，この積分の大きさは $\psi^{(0)}|U|a^2$ の程度になる．したがって $\psi^{(1)}\sim(ma^2|U|/\hbar^2)\psi^{(0)}$ となり，次の条件を得る：

$$|U|\ll\frac{\hbar^2}{ma^2}, \qquad (ka\lesssim 1\text{ のとき}). \tag{45.4}$$

式 $\hbar^2/ma^2$ は簡単な物理的意味をもっていることに注意しよう．それは一辺の長さが a の体積中に閉じこめられた粒子がもつであろう運動エネルギーと同程度の大きさである（不確定関係によって，その運動量が $\hbar/a$ の程度になるからである）．

---

1) これは方程式（45.2）の特解であり，さらにこれに右辺がゼロの方程式（すなわち非摂動方程式（45.1））の任意の解をつけ加えることができる．

とくに条件 (45.4) が満たされているあまり深くないポテンシャルの井戸を考えよう．このような井戸には負のエネルギー準位は存在しないことが容易にわかる (R. Peierls, 1929). 球対称の井戸という特別な場合にこれが成り立つことは，すでに§33の問題で見たとおりである．実際，$E=0$ の場合には非摂動波動関数は定数になるので，それを仮りに1ととることができる: $\psi^{(0)}=1$. ところが $\psi^{(1)}\ll\psi^{(0)}$ であるから，井戸の中の運動の波動関数 $\psi=1+\psi^{(1)}$ がゼロになるところはどこにもないことは明白である．そして節をもたない固有関数は基底状態に属するから，$E=0$ は依然として粒子の可能な最低エネルギー値になっている．したがって井戸があまり深くなければ，粒子にとっては無限遠まで広がる運動だけが可能になる．すなわち粒子は井戸に《捕獲され》ることはない．この結果は特に量子的な性格をもっていることに注意する必要がある．古典力学ではポテンシャルの井戸がどのようであっても，粒子はその中で有界の運動を行なうことができる．

上述のことはすべて3次元の井戸にだけ当てはまることを強調しておく必要がある．1次元と2次元の（すなわち場が1個または2個の座標のみの関数となる）井戸の場合には，必ず負のエネルギー準位が存在する（この節の問題を参照)．これは1次元および2次元の場合には，エネルギー E がゼロの（あるいは非常に小さい）とき，すでに考察した摂動論が一般には適用できないことと関連している[1].

エネルギーが高くて $ka\gg1$ となるような場合には，被積分式中の因子 e^{ikr} は積分の値を大幅に小さくする点で重要な役割を演じている．この場合解 (45.3) は別の形に変換できるが，これを導くためには直接に方程式 (45.2) と取り組む方がつごうがよい．x 軸を非摂動運動の方向に選ぶと，非摂動波動関数は $\psi^{(0)}=e^{ikx}$ という形になる（定数因子は仮りに1と考えておく)．方程式

$$\triangle\psi^{(1)}+k^2\psi^{(1)}=\frac{2m}{\hbar^2}Ue^{ikx}$$

---

1) （2次元波動方程式のよく知られた理論から)，2次元の場合には $\psi^{(1)}$ は (45.3) と類似であるが，$\frac{e^{ikr}}{r}dx'dy'dz'$ のかわりに $i\pi H_0^{(1)}(kr)dx'dy'$ の入った積分形であらわされる ($H_0^{(1)}$ はゼロ次の第1種ハンケル関数)．また $r=\sqrt{(x'-x)^2+(y'-y)^2}$ である．$k\to0$ とするとハンケル関数ならびに全積分が対数的に無限大になる．

同様に1次元の場合には，$\psi^{(1)}$ を定義する積分記号の中に $2\pi i\frac{e^{ikr}}{k}dx'$（ここで $r=|x'-x|$）があらわれる．そして $k\to0$ とすれば $\psi^{(1)}$ は $1/k$ のように無限大になる．

の解を$\psi^{(1)}=e^{ikx}f$なる形に求めてみよう．このときkの大きさが大きいことを仮定したので，$\triangle\psi^{(1)}$の中では因子e^{ikx}が（1回でもよいから）微分された項だけを残せば十分である．そうすればfに対して次の方程式が得られる：

$$2ik\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{2mU}{\hbar^2}.$$

これから

$$\psi^{(1)}=e^{ikx}f=-\frac{im}{\hbar^2k}e^{ikx}\int Udx \tag{45.5}$$

となる．

この積分の大きさを見積ると$|\psi^{(1)}|\sim m|U|a/\hbar^2k$となる．したがってこの場合に摂動論を適用できる条件は

$$|U|\ll\frac{\hbar^2}{ma^2}ka=\frac{\hbar v}{a}\quad(ka\gg1) \tag{45.6}$$

となる（$v=k\hbar/m$は粒子速度）．この条件は（45.4）よりずっと弱いことに注意しよう．したがって，もしも粒子のエネルギーが低いときに場を摂動とみなすことが可能ならば，エネルギーの高いときは必ずこの見方が可能である．ただしその逆は一般には成り立たない[1]．

この節で展開した摂動論のクーロン場への適用性の問題は特別の考察を必要とする．場$U=\alpha/r$の中では，有限の空間領域を限ってその外側では内側よりもUがいちじるしく小さくなるようにすることはできない．そこで（45.6）の中でパラメーターaのかわりに距離変数rを書き入れれば，求める条件を得ることができる．そしてこれから不等式

$$\frac{\alpha}{\hbar v}\ll1 \tag{45.7}$$

が導かれる．したがって粒子のエネルギーが高い場合には，クーロン場を摂動とみなすことができる[2]．

最後に，いたるところでポテンシャル・エネルギーUを大きく上回るよう

1）1次元の場合には，摂動論の適用条件はすべてのkaに対して不等式（45.6）で与えられる．3次元の場合に行なったような条件（45.4）の導き方は，1次元の場合にはこの方法でつくった関数$\psi^{(1)}$が186頁の脚注で注意したように発散するので不可能である．

2）場$U=\alpha/r$を含む積分（45.5）は$x/\sqrt{y^2+z^2}$が大きいところで（対数的に）発散することを考慮しなければならない．したがって，摂動論を用いて得たクーロン場の中の波動関数はx軸のまわりの狭い円錐の内部には適用することができない．

なエネルギー E をもつ粒子の波動関数を近似的に定める公式を導いておこう（この場合にはこれ以外の条件をみたす必要は何もない）．1次近似では波動関数の座標への依存性は自由運動のときと同じである（この運動方向を x 軸に選ぶ）．これに対応して ψ を $\psi=e^{ikx}F$ の形に求めよう．ここで F は因子 e^{ikx} にくらべてゆっくり変化する座標の関数である（しかしそれが1に近いかどうかは一般にはいえない）．シュレーディンガー方程式に代入すると，F に対する方程式

$$2ik\frac{\partial F}{\partial x}=\frac{2m}{\hbar^2}UF \tag{45.8}$$

が得られる．これから

$$\psi=e^{ikx}F=\text{const}\cdot e^{ikx}\exp\left(-\frac{i}{\hbar v}\int U dx\right) \tag{45.9}$$

となる．これが求める式である．しかしこれは非常な遠距離へは適用できないことを覚えておくべきである．方程式（45.8）では F の2階微分を含む項 ΔF を省略した．微分 $\partial^2F/\partial x^2$ は遠方で1階微分 $\partial F/\partial x$ とともにゼロに近づく．しかし横方向の座標 y, z についての微分はゼロに近づかないので，これを省略することは条件 $x\ll ka^2$ のみたされる場合にのみ許されるのである．

問　　題

1.　1次元の浅いポテンシャルの井戸の中のエネルギー準位を求めよ；条件（45.4）が満たされているものと仮定する．

解　結果から確かめられるのであるが，エネルギー準位を $|E|\ll|U|$ と仮定する．そうすればシュレーディンガー方程式

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}(U(x)-E)\psi$$

の右辺では井戸の内部で E を省略することができる．また ψ を定数と考えて1と置いても一般性を失うことはない：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}U.$$

$a\ll x_1\ll 1/\kappa$ をみたす2点 $\pm x_1$ 間でこの方程式を x について積分しよう．ここで a は井戸の幅，また $\kappa=\sqrt{2m|E|}/\hbar$ である．$U(x)$ の積分が収束することを考慮すれば，右辺で積分範囲を $-\infty$ から $+\infty$ までの全領域に拡げることができる：

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-x_1}^{x_1}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty}U dx. \tag{1}$$

井戸から離れたところでは，波動関数の形は $\psi=e^{\pm\kappa x}$ である．これを (1) に代入すれば

$$-2\kappa=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty}Udx$$

あるいは

$$|E|=\frac{m}{2\hbar^2}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}Udx\right)^2$$

が得られる．準位の大きさは井戸の深さより高次（2次）の微小量で，はじめに行なった仮定どおりになっていることがわかる．

2.　2次元の浅いポテンシャルの井戸 $U(r)$ (r は平面内の動径座標) の中のエネルギー準位を求めよ；積分 $\int_0^\infty rUdr$ は収束すると仮定する．

解　前問と同様にして井戸の内部では方程式

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\psi}{dr}\right)=\frac{2m}{\hbar^2}U$$

が得られる．これを r について0から r_1（ここで $a\ll r_1\ll 1/\kappa$）まで積分すれば

$$\left.\frac{d\psi}{dr}\right|_{r=r_1}=\frac{2m}{\hbar^2 r_1}\int_0^\infty rU(r)dr \tag{1}$$

となる．井戸から遠方では2次元自由運動の方程式

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\psi}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

は（無限遠でゼロになる解）$\psi=\mathrm{const}\cdot H_0^{(1)}(i\kappa r)$ をもっている．引数の値が小さいときこの関数の主項は $\ln\kappa r$ に比例する．このことを考慮し，井戸の内側（(1) の右辺）と外側で計算した ψ の対数微分を $r\sim a$ のところで等しいと置くと次の式が得られる：

$$\frac{1}{a\ln\kappa a}\approx\frac{2m}{\hbar^2 a}\int_0^\infty U(r)rdr.$$

これから

$$|E|\sim\frac{\hbar^2}{ma^2}\exp\left[-\frac{\hbar^2}{m}\left|\int_0^\infty Urdr\right|^{-1}\right]$$

となる．エネルギー準位は井戸の深さに比べて指数関数的に小さいことがわかる．

第7章　準古典的な場合

§46. 準古典的な場合の波動関数

もしも粒子のド・ブロイ波長が，与えられた具体的問題の諸条件を決めている特徴的な大きさLに比べて短いと，系の性質は古典的なものに近づく（これは波長がゼロになる極限で波動光学が幾何光学に移るのと似ている）．

準古典的な系の性質をこれからより詳細に研究しよう．このためにシュレーディンガー方程式

$$\sum_a \frac{\hbar^2}{2m_a}\triangle_a\psi+(E-U)\psi=0$$

において，次のように形式的な置きかえを行なう：

$$\psi=e^{i\sigma/\hbar}. \tag{46.1}$$

関数σに対して次の方程式が得られる：

$$\sum_a \frac{1}{2m_a}(\nabla_a\sigma)^2-\sum_a \frac{i\hbar}{2m_a}\triangle_a\sigma=E-U. \tag{46.2}$$

系はそれ自身の性質がほとんど古典的と仮定しているので，σを$\hbar$のベキに展開して

$$\sigma=\sigma_0+\frac{\hbar}{i}\sigma_1+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2+\cdots \tag{46.3}$$

なる級数の形に求めよう．

もっともかんたんな場合である1粒子の1次元運動の考察からはじめよう．このときは方程式（46.2）は次の式になる：

$$\frac{1}{2m}\sigma'^2-\frac{i\hbar}{2m}\sigma''=E-U(x) \tag{46.4}$$

（ここでダッシュは座標xに関する微分を意味する）．

1次近似では$\sigma=\sigma_0$と書き，方程式の中の$\hbar$を含む項を無視すると

$$\frac{1}{2m}\sigma_0'^2=E-U(x)$$

となる．これから

$$\sigma_0 = \pm\int\sqrt{2m[E-U(x)]}dx$$

であることがわかる．被積分関数は，座標の関数の形にあらわされた粒子の古典的運動量 $p(x)$ に他ならない．根号の前に符号 + をつけたものを関数 $p(x)$ と定義すると

$$\sigma_0 = \pm\int p dx, \qquad p=\sqrt{2m(E-U)} \tag{46.5}$$

である．これは波動関数に対する極限の式 (6.1) からも当然期待される式である[1]．

式 (46.4) で行なった近似が妥当であるのは，この等式の左辺の第２項が第１項に比べて小さい場合のみである．すなわち $\hbar|\sigma''/\sigma'^2|\ll 1$ あるいは

$$\left|\frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar}{\sigma'}\right)\right|\ll 1$$

でなければならない．１次近似では (46.5) により $\sigma'=p$ であるから，得られた条件は次の形に書くことができる．

$$\left|\frac{d\bar{\lambda}}{dx}\right|\ll 1. \tag{46.6}$$

ここで $\bar{\lambda}=\lambda/2\pi$ である．そして $\lambda(x)=2\pi\hbar/p(x)$ は古典的な x の関数 $p(x)$ を用いてあらわした粒子のド・ブロイ波長である．これで定量的な**準古典性の条件**が得られた．すなわち粒子の波長はそれ自身と同程度の距離ではほとんど変わらないとしなければならない．この近似は，この条件が満たされない空間の領域には適用できない．

条件 (46.6) は別の形に書くことができる．そのために次のことに注意する：

$$\frac{dp}{dx}=\frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-U)}$$
$$=-\frac{m}{p}\frac{dU}{dx}=\frac{mF}{p}.$$

---

1) よく知られているように，$\int pdx$ は作用の時間に依存しない部分である．粒子の全力学的作用 S は $S=-Et\pm\int pdx$ である．われわれは時間に依存しない波動関数 ψ を考察しているので，σ_0 の中には $-Et$ の項はない．

ここで $F=-dU/dx$ は外場の中の粒子に働く古典的な力である．この力を用いれば

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3}\ll 1 \tag{46.7}$$

であることがわかる．これから明らかなように，粒子の運動量が小さすぎると準古典的近似は適用できなくなる．とくに**回帰点**の近くには，すなわち古典力学に従えば粒子が止まり次いで反対方向へ向かって動き始める点の近傍には，この近似は適用できないことは明らかである．このような点は式 $p(x)=0$，すなわち $E=U(x)$ により決定される．$p\to 0$ のときにはド・ブロイ波長は無限大に発散する．したがって決して短波長とは考えられない．

しかしながら条件（46.6）または（46.7）それ自身だけでは，準古典的近似が成り立つために不十分であることを強調しよう．この条件は微分方程式(46.4)の各項の大きさの比較からえられたのであるが，そのとき小さいとして軽視される項に高次の微分が含まれていることが問題なのである．現実にはこの方程式の解の展開の各項が小さいことが必要なのに，方程式の中で軽視される項が小さいからといって，解の各項が小さいという保障にはならないからである．たとえば，解 $\sigma(x)$ の中に座標 x とともに線形に近い法則で増大する項が含まれているとしよう．すると，それの 2 次微分は方程式の中で小さいが，それはこの項が十分遠方で大きな値を《獲得》することを妨げてはいない．このような状況が生じるのは，一般的に言って，特徴的な長さ L にくらべて大きい距離にわたって場が拡がり，その範囲で場が顕著に変動する場合である［後の式（46.11）に関連した議論を見よ］．準古典的近似はその場合には，大きい距離での波動関数の振舞いの研究に適用できなくなる．

展開式（46.3）の中の次の項の計算に進もう．方程式（46.4）の $\hbar$ に関して 1 次の項から $\sigma_0'\sigma_1'+\sigma_0''/2=0$ を得る．これから

$$\sigma_1'=-\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'}=-\frac{p'}{2p}$$

となる．これを積分して

$$\sigma_1=-\frac{1}{2}\ln p \tag{46.8}$$

であることがわかる（積分定数は無視する）．

得られた式を（46.1）および（46.3）に代入して，次の形の波動関数を得る：

$$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int p dx\right)+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int p dx\right). \qquad (46.9)$$

波動関数の中の $1/\sqrt{p}$ なる因子は，かんたんに解釈できる．座標が x と $x+dx$ の間の点に粒子を見いだす確率は $|\psi|^2$ によって与えられる．すなわち大体 $1/p$ に比例する．これはまさに《準古典的な粒子》に期待されることである．なぜなら，古典的運動では線分 dx を粒子が通過する時間は粒子の速度（または運動量）に反比例するからである．

$E<U(x)$ であるような**古典的には到達不可能な**空間領域では，関数 $p(x)$ は純虚数であり，したがって指数部分は実数となる．この領域における波動関数の解の一般形は

$$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int |p|\, dx\right)+\frac{C_2}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int |p|\, dx\right). \qquad (46.10)$$

しかしここで考慮すべきことがある．それは，準古典的近似の精度からは，波動関数の中に指数関数的に大きくなる項が《背景》としてあれば，指数関数的に小さな項を残しておく理由はない．その意味で（46.10）の中に二つの項を同時に残しておくことは，ふつうは許されないということである．

一般に波動関数の中のより高次の微小量の項を用いる必要はないが，準古典的近似の精度に関する二，三の点を指摘するため，さらに展開式（46.3）の次の項をここで導くことにしよう．

方程式（46.4）で $\hbar$ の2次の項は

$$\sigma_0'\sigma_2'+\frac{1}{2}\sigma_1'^2+\frac{1}{2}\sigma_1''=0$$

となり，これから（σ_0 および σ_1 として（46.5）および（46.8）を代入すると）

$$\sigma_2'=\frac{p''}{4p^2}-\frac{3p'^2}{8p^3}$$

を得る．これを積分し（第1項は部分積分する），また力 $F=pp'/m$ を導入すると次式を得る：

$$\sigma_2=\frac{mF}{4p^3}+\frac{m^2}{8}\int\frac{F^2}{p^5}dx.$$

この近似における波動関数は

$$\psi=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sigma\right)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sigma_0+\sigma_1\right)(1-i\hbar\sigma_2)$$

あるいは次の形をもつ：

$$\psi=\frac{\text{const}}{\sqrt{p}}\left[1-\frac{im\hbar}{4}\frac{F}{p^3}-\frac{i\hbar m^2}{8}\int\frac{F^2}{p^5}dx\right]\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int p\,dx\right). \quad (46.11)$$

指数関数の前の係数因子の中に虚数の補正項が現われたことは，波動関数の位相に同様の補正が現われたことに等しい$\left(\right.$つまり指数関数の中の積分 $\frac{1}{\hbar}\int p\,dx$ に付加項が生ずることである$\left.\right)$. この補正は $\hbar$ に比例し，つまり量 λ/L の程度の大きさを持つ.

(46.11) の角括弧の中の第2および第3の項は1にくらべて小さくなければならない. 前者の場合には，この条件は (46.7) そのものである. しかし，後者の場合には，積分の評価からわかるように，F^2 が距離 $\sim L$ の間に十分速くゼロとなる場合のみ，この条件は条件 (46.7) にもって行くことができる.

§ 47. 準古典的な場合の境界条件

いま $x=a$ を回帰点（したがって $U(a)=E$）とする. また $x>a$ ではいつも $U>E$ であるとしよう. したがって回帰点の右側の領域は古典的には到達不可能である. 波動関数はこの領域の内部へ向かって減衰する. 回帰点から十分離れたところでは，波動関数は次の形となる：

$$x>a \text{ では} \quad \psi=\frac{C}{2\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|\right). \quad (47.1)$$

これは (46.10) の第1項に対応している. 回帰点の左側では波動関数はシュレーディンガー方程式の二つの準古典的解の実係数結合 (46.9) であらわされなければならない：

$$x<a \text{ では} \quad \psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right)+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right). \quad (47.2)$$

この結合係数を決定するには，正の $x-a$ [ここで (47.1) が成り立つ] から負の $x-a$ へ移るときに波動関数がどのように変わるかを調べなければならない. しかしそのときには停止点の近くの領域を通過することになる. そこでは準古典的近似が適用できなくて，シュレーディンガー方程式の正確な解を考え

る必要がある．小さい $|x-a|$ に対して

$$E-U(x)\approx F_0(x-a),\qquad F_0=-\left.\frac{dU}{dx}\right|_{x=a}<0 \tag{47.3}$$

を得る．言いかえると，この領域では一様な場の中の運動の問題を扱うことになる．この領域におけるシュレーディンガー方程式の厳密解は§24に与えられており，(47.1) と (47.2) の係数の間の関係は，回帰点の両側でのこの厳密解の漸近式 (24.5) と (24.6) を比較することによって見いだされる．この場合注意すべきことは，(47.3) から $p(x)=\sqrt{2mF_0(x-a)}$ が得られ，したがって積分

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx=\frac{2}{3\hbar}\sqrt{2mF_0}(x-a)^{3/2}$$

は (24.5) の exp または (24.6) の sin の引数のなかの表式と同じである．これらの議論のなかで重要なのは，展開式 (47.3) の適用可能領域と準古典性の領域とは部分的に重なっていることである．それゆえもしも運動が（仮定されているように）場のほとんどすべての領域で準古典的であるならば，展開式 (47.3) が成り立つのに十分小さく，しかも同時に準古典性の条件が満たされ，漸近式 (24.5) と (24.6) が適用できるほど十分大きい値 $|x-a|$ が存在する[1]．

しかしながら，厳密解を一般に必要としないですむ別の方法があり，これは方法論的にも大変教訓的である．このためには形式的に $\psi(x)$ を複素変数 x の関数とみなし，$x-a$ が正から負へ移るには，点 $x=a$ から十分遠く離れた道を通って，この道の上ではどこでも準古典性の条件が形式的に満たされているようにしなければならない (A. Zwaan, 1929)．このためには，同時に展開式 (47.3) が満たされるような値 $|x-a|$ をふたたび考察しよう．すると波動関数 (47.1) は次の形をとる：

$$\psi(x)=\frac{C}{2\sqrt{2m|F_0|}}\frac{1}{(x-a)^{1/4}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x\sqrt{2m|F_0|(x-a)}\,dx\right\}. \tag{47.4}$$

最初に，複素数 x の上半平面で，点 $x=a$ のまわりを右から左へ（半径 ρ の）半円にそって迂回する場合のこの関数の変化を研究しよう．この半円上では

1) 実際に，展開式 (47.3) は $|x-a|\ll L$ ならば適用できる．ここで L は場 $U(x)$ の変動の特徴的な長さである．準古典性の条件 (46.7) は $|x-a|^{3/2}\gg\hbar/\sqrt{m|F_0|}$ であることを要求する．これら二つの条件は矛盾しない．なぜならば，回帰点から遠く離れて（つまり $|x-a|\sim L$ において）運動が準古典的であることは，$L^{3/2}\gg\hbar/\sqrt{m|F_0|}$ であることを意味するからである．

$$x-a=\rho e^{i\varphi},\quad \int_a^x \sqrt{x-a}\,dx=\frac{2}{3}\rho^{3/2}\left(\cos\frac{3\varphi}{2}+i\sin\frac{3\varphi}{2}\right)$$

であり，ここで位相 φ は 0 から π へ変化する．ここで (47.4) の中の指数因子は最初 ($0<\varphi<2\pi/3$ の 間) 絶対値が増加し，その後絶対値が 1 になるまで減少する．この迂回の終りには指数関数の引数は純虚数となり，次式のようになる：

$$-\frac{i}{\hbar}\int_a^x \sqrt{2m|F_0|(a-x)}\,dx=-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(x)\,dx.$$

(47.4) における指数関数の前の因子は迂回の結果

$$(x-a)^{-1/4}\longrightarrow(a-x)^{-1/4}e^{-i\pi/4}$$

となる．このようなわけで，(47.4) の関数すべては，(47.2) の第 2 項で係数を $C_2=\frac{1}{2}Ce^{-i\pi/4}$ と置いたものに移行する．

上の半平面を通る迂回によって，(47.2) における係数 C_2 しか決定できないという事実は，かんたんに説明することができる．もしも逆の方向に（左から右へ）同じ半円にそって迂回して関数 (47.2) の変化を調べると，迂回の初めに第 2 項にくらべて第 1 項が急速に指数関数的に小さくなっていることがわかる．しかしながら準古典的近似のために，ψ の中の大きい主要項の《背景》の下では指数関数的に小さい項を保留するわけにはいかず，このことが迂回を行なうと (47.2) における第 1 項が《失われる》理由である．

係数 C_1 を決定するためには，複素数 x の下の半平面の半円にそって右から左への迂回を行なわなければならない．前と同様にこの場合関数 (47.4) は，(47.2) の第 1 項で係数を $C_1=\frac{1}{2}Ce^{i\pi/4}$ と置いたものに移行する．

このようにして $x>a$ での波動関数 (47.1) は，$x<a$ での関数

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)$$

に対応する．ここで得られた対応規則は，古典的に到達不可能な領域が回帰点のどちらの側に存在するかに依存しない形に書くことができる：

$$U(x)>E \text{ における }\quad \frac{C}{2\sqrt{|p|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|\right\}$$

$$\longrightarrow U(x)<E \text{ における }\quad \frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|-\frac{\pi}{4}\right\}\qquad(47.5)$$

(H. A. Kramers, 1926).

上の証明で明らかなように，この規則は回帰点の片側に課された特定の境界条件に関連しており，この意味で特定の方向にしか適用できないことをもう一度強調しておく．すなわち規則（47.5）は古典的に到達不可能な領域の奥へ向かって $\psi\to 0$ となる境界条件によって得られたので，［(47.5) で矢印で示すように[1]］古典的に到達不可能な領域から古典的に許される領域へ移行する場合に適用されなければならない．

もしも古典的に到達可能な領域が（$x=a$ にある）無限に高い《ポテンシャルの壁》によって限られていれば，$x=a$ における波動関数の境界条件は $\psi=0$ である（§18 参照）．この場合には準古典的な近似は《壁》際まで適用されて，波動関数は

$$x<a \text{ では}\quad \psi=\frac{C}{\sqrt{p}}\sin\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx,$$
$$x>a \text{ では}\quad \psi=0 \tag{47.6}$$

となる．

§ 48. ボーア=ゾンマーフェルトの量子化の規則

エネルギーの離散スペクトルを持つ状態は，状態の順序数である量子数 n の値が大きいときに準古典的である．実際にこの数は固有関数の節の数を決定する（§21 参照）．ところが隣りあう節の間の距離はド・ブロイ波長と大きさの程度が同じである．大きい n に対してこの距離は小さく，したがって波長は運動の領域の大きさにくらべて小さい．

準古典的な場合における量子エネルギー準位を決定する条件を導くことができる．このために，ポテンシャルの井戸の中の粒子の有界な1次元運動を考察しよう；古典的に到達可能な領域 $b\leqq x\leqq a$ は二つの回帰点によって限られている[2]．

1）逆方向への移行は意味を持たない．そのわけは（47.5）の右側の波動関数の小さい変動ですら，左側の関数に指数関数的に増大する項を生ずることになるからである．

2）古典力学では，このような場の中にある粒子は周期運動を行ない，その周期（点 b から点 a へ行ってまたもどるまでの時間）は

$$T=2\int_b^a\frac{dx}{v}=2m\int_b^a\frac{dx}{p}$$

となる（v は粒子の速度）．

対応規則 (47.5) によれば点 $x=b$ における境界条件からは，(その点の右側の領域で) 波動関数

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\,dx-\frac{\pi}{4}\right) \tag{48.1}$$

が導かれる．これと同じ規則を点 $x=a$ の左側の領域に適用すると，同じ関数が次の形で得られる：

$$\psi=\frac{C'}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\,dx-\frac{\pi}{4}\right).$$

これらの二式がすべての範囲で一致するためには，それらの位相の和 (それは定数の量である) が π の整数倍でなければならない：

$$\frac{1}{\hbar}\int_b^a p\,dx-\frac{\pi}{2}=n\pi$$

(そして $C=(-1)^nC'$ である)．これから

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint p\,dx=n+\frac{1}{2} \tag{48.2}$$

となる．ここで積分 $\oint p\,dx=2\int_b^a p\,dx$ は粒子の古典的運動の全周期にそって行なわれる．これが準古典的な場合における粒子の定常状態を決定する条件である．これは前期量子論の**ボーア=ゾンマーフェルトの量子化の規則**に相当するものである．

容易にわかるように，整数 n は波動関数のゼロ点の数と等しく，したがって定常状態の配列番号である．実際，波動関数 (48.1) の位相は点 $x=b$ の $-\pi/4$ から点 $x=a$ の $(n+1/4)\pi$ まで増加する．したがってこの余弦関数はこの範囲で n 回ゼロとなる ($b\leqq x\leqq a$ なる領域外では波動関数は単調に減少し，有限の距離にはゼロ点をもたない)[1]．

上で述べたように準古典的な場合には数 n が大きい．(48.2) で n に加えられた 1/2 の項を保持することはそれでも理にかなっていることを強調しよう：波動関数の位相の中の次の修正項を計算すると，(48.2) の右辺に 1 にくらべて小さい $\sim\lambda/L$ 程度の項が出現するにすぎないからである[1] (§46 の終りの注

1) 厳密にいうと，ゼロ点の数の勘定は回帰点近傍における波動関数の正確な形を考慮して行なわれなければならない．このような研究は本文に示した結果を再確認する．

意を参照).

波動関数を規格化するためには，$|\psi|^2$ を $b \leqq x \leqq a$ の範囲だけで積分すれば十分である．この範囲をでると $\psi(x)$ は指数関数的に減少するからである．(48.1) における余弦関数の引数は急激に変動する関数であるので，余弦関数の自乗をその平均値，つまり 1/2 に置きかえても十分正確である．したがって

$$\int|\psi|^2 dx \approx \frac{C^2}{2}\int_b^a \frac{dx}{p(x)} = \frac{\pi C^2}{2m\omega} = 1$$

を得る．ここで $\omega = 2\pi/T$ は古典的な周期運動の振動数である．したがって，規格化された準古典的な関数は

$$\psi = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p dx - \frac{\pi}{4}\right) \tag{48.3}$$

である．一般的にいって振動数 ω はエネルギーの関数であり，異なる準位に対しては異なっていることを覚えておくべきである．

関係式 (48.2) はまた別の解釈をすることができる．積分 $\oint p dx$ は粒子の古典的な閉じた位相軌道（つまり粒子の位相空間である p, x 平面上の曲線）によって囲まれた面積である．この面積をそれぞれの面積が $2\pi\hbar$ の細胞に分けると，全部で n 個の細胞を得る．ところが n は（考察している位相軌道に対応する）あるエネルギーの値以下のエネルギーをもつ量子状態の数である．したがって次のようにいうことができる：準古典的な場合には，各量子状態には位相空間内の面積 $2\pi\hbar$ の**細胞**が対応している．いいかえると，位相空間の体積要素 $\Delta p \Delta x$ に含まれる状態の数は

$$\frac{\Delta p \Delta x}{2\pi\hbar} \tag{48.4}$$

である．もしも運動量のかわりに波動ベクトル $k = p/\hbar$ を導入すると，この数は $\Delta k \Delta x / 2\pi$ と書ける．これは期待されるように波動場の固有振動の数のよく知られた式と一致している（第Ⅱ巻『場の古典論』§52 参照).

量子化の規則 (48.2) から出発して，エネルギー・スペクトルの中の準位の分布の一般的な性質を明らかにすることができる．いま ΔE を二つの相隣る準

1)　ある場合には，正確なシュレーディンガー方程式から得られるエネルギー準位の（量子数 n の関数としての）正確な式 $E(n)$ は $n \to \infty$ においてもその形を保存することがある．その例はクーロン場におけるエネルギー準位と調和振動子のエネルギー準位である．この場合には当然，大きい n に対して適用されるボーアの量子化の規則 (48.2) は関数 $E(n)$ の正確な表式を与える．

位，すなわち量子数 n が 1 だけ異なる準位の間の間隔であるとしよう．すると ΔE は（n が大きいとき）エネルギー準位それ自身の値に比べて小さいので，関係式（48.2）は次のように書きかえられる：

$$\Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = 2\pi\hbar.$$

ところが $\partial E/\partial p = v$ であるので

$$\oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \oint \frac{dx}{v} = T$$

となる．したがって

$$\Delta E = \frac{2\pi}{T}\hbar = \hbar\omega \tag{48.5}$$

を得る．

したがって，相隣る準位の間隔は $\hbar\omega$ に等しいことがわかった．（数 n の差が n 自身の値に比べて小さいような）相隣る準位の列のなかでは対応する振動数 ω は近似的に等しいとみなすことができる．こうして，スペクトルの準古典的な部分のあまり広くない範囲では，準位は同じ間隔 $\hbar\omega$ で等間隔に分布していると結論される．しかしこの結果はあらかじめ期待できたことである．なぜなら準古典的な場合には異なるエネルギー準位の間の遷移に対応する振動数は，古典的な振動数 ω の整数倍でなければならないからである．

任意の物理量 f の行列要素が，古典的な極限において何に移行するかを調べることは興味がある．そのためには，ある量子状態が極限において確定した軌道に沿った粒子運動を与えると考えるならば，その状態における平均値 $\bar{f}$ は極限において単にこの量の古典的な値に移行しなければならないということから出発しよう．このような状態に対応するものは，接近したエネルギー値をもついくつかの定常状態の重ね合わせによって得られる波束である（§6 参照）．このような状態の波動関数は次の形をもつ：

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n.$$

ここで係数 a_n がいちじるしくゼロから外れるのは，$1 \ll \Delta n \ll n$ を満たす量子数 n のある範囲 Δn に限られる．数 n は準古典的な定常状態に対応して大きいと考えられる．f の平均値は定義により

$$\bar{f}=\int\Psi^*\hat{f}\Psi\,dx=\sum_n\sum_m a_m^*a_n f_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$$

である．あるいは n, m に関する和を，n および差 $s=m-n$ に関する和に置きかえると

$$\bar{f}=\sum_n\sum_s a_{n+s}^*a_n f_{n+s,n}e^{i\omega st}.$$

ここで（48.5）に従って $\omega_{mn}=s\omega$ と書いた．

準古典的な波動関数を用いて計算される行列要素 f_{nm} の値は，差 $m-n$ が増大するとともに急速に減少するが，同時に（$m-n$ が一定のときは）数 n 自身の関数としてはゆっくりと変化する．このため近似的に次のように書くことができる：

$$\bar{f}=\sum_n\sum_s a_n^*a_n f_s e^{i\omega st}=\sum_n|a_n|^2\sum_s f_s e^{i\omega st}.$$

ここで記号

$$f_s=f_{\bar{n}+s,\bar{n}}$$

を導入した．$\bar{n}$ は範囲 Δn にある量子数の平均値である．ところが $\sum_n|a_n|^2=1$ である．したがって

$$\bar{f}=\sum_s f_s e^{i\omega st}$$

となる．得られた和は普通のフーリエ級数の形をしている．$\bar{f}$ は極限において古典的な量 $f(t)$ に一致しなければならないので，行列要素 f_{mn} は極限において古典的な関数 $f(t)$ をフーリエ級数の形に展開した成分 f_{m-n} に移行すると結論される．

同様に連続スペクトルの状態間の遷移に対する行列要素は，フーリエ積分による $f(t)$ の展開の成分に移行する．この場合には定常状態の波動関数は，$\hbar$ で割られたエネルギーを引数とする δ-関数によって規格化されなければならない．

上述のすべての結果を，有限の運動を行なっている多くの自由度をもつ系に対して一般化することは，その（古典）力学の問題がハミルトン=ヤコビの方法の中で完全に変数分離可能ならば（いわゆる条件つき周期運動），容易である（第I巻『力学』§52参照）．各自由度に対して変数分離を行なうと問題は1次元に帰着し，それに対応する量子化条件は

$$\oint p_i dq_i=2\pi\hbar(n_i+\gamma_i) \tag{48.6}$$

の形となる．ここで積分は一般化座標 q_i の変動の周期に沿って行なわれ，γ_i は 1 の程度の数で，その自由度に対する境界条件の性質に依存している[1]．

（条件つき周期運動でない）一般的な任意の多次元運動の場合には，準古典的量子化の条件の定式化のためにはもっと深い議論が必要である[2]．しかし位相空間における《細胞》という概念は（準古典的な近似において）いつも適用できる．このことは位相空間のある体積中の波動場の固有振動の数と細胞の数とのすでに指摘した関係から明らかである．一般的な s 個の自由度をもつ系の場合には，位相空間の体積要素には

$$\Delta N=\frac{\Delta q_1\cdots\Delta q_s\Delta p_1\cdots\Delta p_s}{(2\pi\hbar)^s} \tag{48.7}$$

個の量子状態が対応する[3]．

問　　題

1. 準古典性の条件を満足する場 $U(\boldsymbol{r})$ の中を運動する粒子の離散的なエネルギー準位の数を（近似的に）求めよ．

解　粒子の運動量が $0\leqq p\leqq p_{\max}$ なる範囲に，また位置座標が体積要素 dV にあるときに対応する位相空間の体積に《見合った》状態数は

$$\frac{\frac{4\pi}{3}p_{\max}^3dV}{(2\pi\hbar)^3}$$

である．

$\boldsymbol{r}$ が与えられたとき，（古典的な運動をする）粒子は条件 $E=p^2/2m+U(\boldsymbol{r})\leqq 0$ を満足する運動量をもっている．$p_{\max}=\sqrt{-2mU(\boldsymbol{r})}$ を代入すると，離散スペクトルの状態の総数は

$$\frac{\sqrt{2}}{3\pi^2}\frac{m^{3/2}}{\hbar^3}\int(-U)^{3/2}dV$$

1）たとえば，中心対称場の中の運動に対しては，

$$\oint p_r dr=2\pi\hbar\left(n_r+\frac{1}{2}\right),\quad \oint p_\theta d\theta=2\pi\hbar\left(l-m+\frac{1}{2}\right),\quad \oint p_\varphi d\psi=2\pi\hbar m$$

（ここで $n_r=n-l-1$ は動径量子数である）．この最後の式は，p_φ が角運動量の z 成分であって $\hbar m$ に等しいことを意味している．

2）J. B. Keller, Annals of Physics, 4, 180 (1958) 参照．

3）とくに，一粒子に対して $d^3p/(2\pi\hbar)^3$ は座標空間の単位体積中の運動量の値の範囲 d^3p に対応する状態の数である．これにより，53頁の脚注で述べた平面波（15.8）の規格化の二つの意味が一致することが明らかになった．

となる．ここで積分は空間の $U<0$ なる範囲にわたって行なわれる．もしも U が無限遠で $s<2$ として r^{-s} のように減少するならば，§18 の結果と同じくこの積分は発散する（準位の数は無限大となる）．

2. 準古典的な中心対称場 $U(r)$ において，上と同じ計算を行なえ（ヴェ・エリ・パクロフスキー В. Л. Покровский）．

解　中心対称場においてはエネルギー準位に角運動量の方向に関する縮退があるため，状態の数はエネルギー準位の数と一致しない．一定の角運動量の値 M をもつ準位の数は，ポテンシャル・エネルギー $U_{\text{eff}}=U(r)+M^2/2mr^2$ なる場の中の1次元運動の（縮退のない）準位の数に一致する．このことに気づけば求める数が得られる．r が与えられ，またエネルギーが $E\leqq 0$ のとき，運動量 p_r の許される最大値は $p_{r\,\max}=\sqrt{-2mU_{\text{eff}}}$ である．したがって状態の数（つまり準位の数）は

$$\int\frac{dr\,dp_r}{2\pi\hbar}=\frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar}\int\sqrt{-U-\frac{M^2}{2mr^2}}\,dr$$

である．

求める離散的な準位の総数は，この式を $M/\hbar$ について積分することによって得られる（準古典的な場合には l に関する和は $M/\hbar$ についての積分にかわる）．これは

$$\frac{m}{4\hbar^2}\int(-U)r\,dr$$

に等しい．

§ 49. 中心対称場の中の準古典的な運動

中心対称場の中の運動では，粒子の波動関数はすでに知っているように角度部分と動径部分とに分解される．はじめにこのうちの前者を考察しよう．

角度波動関数の角度 φ への依存性（これは量子数 m によって決定される）はひじょうにかんたんなので，その近似式を求める問題は一般には起こらない．極角 θ への依存性についていえば，もしも対応する量子数 l が大きければ，一般的な規則に従ってそれは準古典的である（この条件のもっと正確な定式化は以下に与える）．

ここでは応用上もっとも重要な，磁気量子数がゼロ（$m=0$）の場合の角度関数の準古典的な式を導くことだけに話を限ろう[1]．この関数は定数因子を除

1）逆の $m=l$ の場合は，極限において $\theta=\pi/2$ の赤道面にある古典的軌道上の運動に対応しなければならない．実際に

$$P_l^l(\cos\theta)=\text{const}\cdot\sin^l\theta$$

であり，$l\to\infty$ のときこの関数（およびそれとともに $|\psi|^2$）はあらゆる $\theta\neq\pi/2$ に対して0に収束する．

いてルジャンドル多項式 $P_l(\cos\theta)$ ((28.8) 参照) に一致しており，次の微分方程式

$$\frac{d^2P_l}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{dP_l}{d\theta}+l(l+1)P_l=0 \tag{49.1}$$

を満足する．

これに

$$P_l(\cos\theta)=\frac{\chi(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}} \tag{49.2}$$

なる置換を行なうと，方程式

$$\chi''+\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{1}{4\sin^2\theta}\right]\chi=0 \tag{49.3}$$

を得る．これは1次の導関数を含まず，1次元のシュレーディンガー方程式に形が似ている．

方程式 (49.3) で《ド・ブロイ波長》の役を果たすものは

$$\lambda\!\!\!^{-}=\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{1}{4\sin^2\theta}\right]^{-1/2}$$

である．導関数 $d\lambda\!\!\!^{-}/dx$ が小さいという要求 (条件 (46.6)) から，不等式

$$\theta l\gg 1,\qquad (\pi-\theta)l\gg 1 \tag{49.4}$$

が導かれる (これが波動関数の角度部分が準古典的であるための条件である)．大きい l に対しては，ゼロまたは π に非常に近い角度範囲を除く θ のほとんどすべての範囲にわたって，この条件が満たされている．

条件 (49.4) が満たされている場合には，方程式 (49.3) において角括弧の中の第2項は第1項に比べて無視することができる：

$$\chi''+\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\chi=0.$$

この方程式の解は

$$\chi=\sqrt{\sin\theta}P_l(\cos\theta)=A\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\alpha\right] \tag{49.5}$$

である (A,α は定数)．

方程式 (49.1) において $\theta\ll 1$ なる角度に対しては $\cot\theta\approx 1/\theta$ と置くことができる．また近似的に $l(l+1)$ を $(l+1/2)^2$ に置きかえると，方程式

$$\frac{d^2P_l}{d\theta^2}+\frac{1}{\theta}\frac{dP_l}{d\theta}+\left(l+\frac{1}{2}\right)^2P_l=0$$

を得る．この方程式はゼロ次のベッセル関数の解をもつ：

$$P_l(\cos\theta)=J_0\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta\right],\qquad (\theta\ll 1). \tag{49.6}$$

$\theta=0$ において $P_l=1$ でなければならないので，定数因子は1と置かれる．P_l に対する近似式（49.6）は $\theta\ll 1$ なるすべての角度に対して成り立つ．たとえば $1/l\ll\theta\ll 1$ なる範囲の角度にもこれは適用できる．ところが，ここではそれは $\theta\gg 1/l$ なるすべての角度で成り立つ式（49.5）と一致すべきである．$\theta l\gg 1$ では，ベッセル関数を引数の大きい値に対する漸近式に置きかえることができて

$$P_l\approx\sqrt{\frac{2}{\pi l}}\frac{\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{\pi}{4}\right]}{\sqrt{\theta}}$$

を得る（まえの係数の中では，l にくらべて 1/2 を無視してもよい）．これを（49.5）と比較すると $A=\sqrt{2/\pi l}$，$\alpha=\pi/4$ であることがわかる．したがって結局準古典的な場合に適用できる次のような $P_l(\cos\theta)$ の式を得る[1)]：

$$P_l(\cos\theta)\cong\sqrt{\frac{2}{\pi l}}\frac{\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{\pi}{4}\right]}{\sqrt{\sin\theta}}. \tag{49.7}$$

規格化された球関数 Y_{l0} の方も，これから次の形に得られる［(28.8）と比較せよ］．

$$Y_{l0}\approx\frac{i^l}{\pi}\frac{\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{\pi}{4}\right]}{\sqrt{\sin\theta}}. \tag{49.8}$$

波動関数の動径部分へ進もう．§32で示されたように，関数 $\chi(r)=rR(r)$ はポテンシャル・エネルギー

$$U_l(r)=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$$

をもつ1次元のシュレーディンガー方程式を満足する．したがってわれわれはポテンシャル・エネルギーを $U_l(r)$ と考えて，前の数節で得られた結果を適用できる．

$l=0$ の場合がもっともかんたんである．遠心エネルギーが存在せず，もしも

1）$l(l+1)$ を $(l+1/2)^2$ に置きかえたからこそ，得られる式は関数 $P_l(\cos\theta)$ と同じように，θ を $\pi-\theta$ に置きかえたとき $(-1)^l$ 倍されることに注意しよう．

場 $U(r)$ が必要条件（46.6）を満足すると，動径波動関数は全空間で準古典的となる．$r=0$ では $\chi=0$ でなければならない．したがって準古典的な関数 $\chi(r)$ は式（47.6）と同様にして決められる．

もしも $l\neq 0$ ならば，遠心エネルギーもまた条件（46.6）を満足しなければならない．遠心エネルギーが全エネルギーと同程度の大きさであるような小さい r の範囲では，波長 $\lambda\!\!\!^{-}=\hbar/p\sim r/l$ であり，条件（46.6）から $l\gg 1$ が得られる．したがってもしも l があまり大きくないと，r の小さい範囲で遠心エネルギーのために準古典性の条件が破れる．もしも準古典的な波動関数 $\chi(r)$ の位相を1次元運動の公式により計算すると，ポテンシャル・エネルギー $U_l(r)$ の中の係数 $l(l+1)$ を $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$ に置きかえて，

$$U_l(r)=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2} \qquad (49.9)$$

と置けば，位相の正しい値が得られることは容易に確かめることができる[1]．

準古典的な近似をクーロン場 $U=\pm\alpha/r$ に適用できるかどうかは，特別な考察を必要とする問題である．あらゆる運動領域のうちで，$|U|\sim|E|$ すなわち $r\sim\alpha/|E|$ なる距離 r に対応する部分がもっとも重要である．この領域における運動が準古典的であるための条件は，波長 $\lambda\!\!\!^{-}\sim\hbar\sqrt{2m|E|}$ が領域の大きさ $\alpha/|E|$ に比べて小さいことである．これにより

$$|E|\ll\frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \qquad (49.10)$$

を得る．すなわち，エネルギーの絶対値は第1ボーア軌道上の粒子のエネルギーに比べて小さくなければならない．条件（49.10）はまた次の形に書くこともできる．

$$\frac{\alpha}{\hbar v}\gg 1. \qquad (49.11)$$

ここで $v\sim\sqrt{|E|/m}$ は粒子の速度である．この条件はクーロン場に摂動論を適用できるための条件（45.7）と逆になっていることに注意しよう．

近距離の領域（$|U(r)|\gg E$）ではどうかといえば，それがクーロン斥力場の中

1）たとえばもっとも簡単な場合である自由運動（$U=0$）においては，（49.9）の U_l を用いて公式（48.1）から計算した関数の位相は r が大きいところで，あたかも当然のごとく，関数（33.12）の位相に等しくなる．

なら一般に面白いことはなにもない．なぜならば $U>E$ のところで準古典的波動関数は指数関数的に減衰するからである．しかしクーロン引力場の中ならば l が小さいとき，粒子は $|U|\gg|E|$ なる領域に侵入できるので，準古典的近似のここでの適用限界の問題が起こる．一般的な条件（46.7）を用いて，これに

$$F=-\frac{dU}{dr}=-\frac{\alpha}{r^2},\qquad p\approx\sqrt{2m|U|}\sim\sqrt{\frac{m\alpha}{r}}$$

を代入しよう．その結果準古典的な近似を適用できる範囲は

$$r\gg\hbar^2/m\alpha \tag{49.12}$$

なる距離，すなわち第1ボーア軌道の《半径》にくらべて大きい距離によって限られていることがわかる．

問　　題

$r\to0$ のとき，場が $s>2$ として $\pm\alpha/r^s$ のように無限大となる場合に，原点付近での波動関数の振舞いを決定せよ．

解　十分小さい r に対して波長は

$$\lambda\sim\frac{\hbar}{\sqrt{m|U|}}\sim\frac{\hbar r^{s/2}}{\sqrt{m\alpha}}$$

である．それゆえ

$$\frac{d\lambda}{dr}\sim\frac{\hbar}{\sqrt{m\alpha}}r^{s/2-1}\ll1$$

となる．したがって準古典性の条件を満足している．引力場ならば $r\to0$ のとき $U_l\to-\infty$ となる．この場合原点付近の領域は古典的に近づき得て，動径波動関数は $\chi\sim1/\sqrt{p}$ である．これから

$$\psi\sim r^{s/4-1}$$

を得る．

斥力場ならば，小さい r の領域は古典的には近づき得ない．この場合には波動関数は $r\to0$ のとき指数関数的にゼロになる．指数関数の前につく定数因子を無視すると

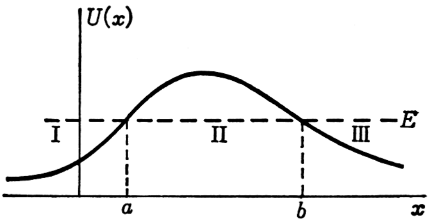
$$\psi\sim\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_{r_0}^{r}p\,dr\right|\right)\quad\text{または}\quad\psi\sim\exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\alpha}}{(s-2)\hbar}r^{-(s/2-1)}\right]$$

を得る．

§ 50. ポテンシャル障壁の透過

第13図に示すような**ポテンシャル障壁**，つまりポテンシャル・エネルギー $U(x)$ が粒子の全エネルギー E を上まわる区間の存在を特徴とする場の中の粒

子の運動を考察しよう．古典力学ではポテンシャル障壁は粒子にとって不透過である．ところが量子力学では粒子はゼロでない確率で《障壁を透過する》（この現象はまた**トンネル効果**とも呼ばれる）[1]．もしも場 $U(x)$ が準古典性の条件



第 13 図

を満足していると，障壁の透過係数は一般的な形で計算できる．この条件からは特に，障壁が幅広くなければならず，したがって準古典的な場合の透過係数は小さいことが導かれる．

あとの計算への続きを考えて，あらかじめ次の問題を解いておこう．回帰点 $x=b$ の右側の領域（ここで $U(x)<E$）で，準古典的な波動関数が進行波

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p\,dx+\frac{i\pi}{4}\right) \tag{50.1}$$

の形をもつとしよう．このとき $x<b$ なる領域で同じ状態の波動関数を求める必要がある．これを行なうには，§47 で行なったのと同じ複素平面 x での迂回の方法によることにする．さて

$$E-U(x)\approx F_0(x-b),\qquad F_0>0$$

と置いて，関数（50.1）を次の形に書く：

$$\psi(x)=\frac{C}{\sqrt{2mF_0}}\frac{1}{(x-b)^{1/4}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mF_0}\int_b^x\sqrt{x-b}\,dx+\frac{i\pi}{4}\right\}.$$

そしてここで上の半平面の半円にそって右から左への迂回を行なう：

$$x-b=\rho e^{i\varphi},\qquad i\int_b^x\sqrt{x-b}\,dx=\frac{2}{3}\rho^{3/2}\left(-\sin\frac{3\varphi}{2}+i\cos\frac{3\varphi}{2}\right).$$

ここで位相 φ は 0 から π へ変わる．迂回の過程で，関数 $\psi(x)$ は初めは絶対値が減少し，ついで増大し，迂回の最後には次の値になる：

$$\psi(x)=\frac{C}{\sqrt{2mF_0}}\frac{1}{(b-x)^{1/4}e^{i\pi/4}}\exp\left\{\frac{1}{\hbar}\int_x^b\sqrt{2mF_0(b-x)}\,dx+\frac{i\pi}{4}\right\}.$$

1）この種の例は，すでに§25 の問題 2 で考察した．

このようにして，次の対応規則を得る[1]．

$$\frac{C}{\sqrt{p}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_b^x p\,dx+\frac{i\pi}{4}\right\}_{x>b}\longrightarrow\frac{C}{\sqrt{|p|}}\exp\left\{\frac{1}{\hbar}\left|\int_b^x p\,dx\right|\right\}_{x<b}. \qquad (50.2)$$

この規則は，古典的に許される領域で波動関数に特定の形（右向きの進行波）を仮定しているので，その領域から古典的に到達不可能な領域への移行に対して適用されなければならないことを強調しておく．

ここでポテンシャル障壁の透過係数を計算する問題に戻ろう．粒子が領域Ⅰから障壁に向かって，左から右へ入射するとしよう．すると障壁の後の領域Ⅲには障壁を透過した波だけが存在し，これは右へ伝播している．この領域での波動関数を次の形に書こう：

$$\psi=\sqrt{\frac{D}{v}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p\,dx+\frac{i\pi}{4}\right). \qquad (50.3)$$

ここで $v=p/m$ は粒子の速度，D は波の中の流れの密度である．規則（50.2）により，障壁の中の領域Ⅱにおける波動関数を求めよう．

$$\psi=\sqrt{\frac{D}{|v|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_x^b p\,dx\right|\right)=\sqrt{\frac{D}{|v|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^b p\,dx\right|-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|\right). \qquad (50.4)$$

最後に規則（47.5）を適用すると，障壁の前の領域Ⅰでは

$$\psi=2\sqrt{\frac{D}{v}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)$$

を得る．

この関数に

$$D=\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right) \qquad (50.5)$$

を代入すると，次の形になる：

$$\psi=\frac{2}{\sqrt{v}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{v}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx+\frac{i\pi}{4}\right)+\frac{1}{\sqrt{v}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx-\frac{i\pi}{4}\right).$$

---

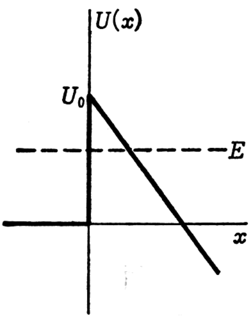
1) 下半面を右から左へ迂回すると，関数 $\psi(x)$ ははじめ絶対値が増大し，つぎに減少して，左の半軸（$\varphi\to-\pi$）上で指数関数的に小さな量となるので，指数関数的に大きな関数（50.2）の《背景》の前では，それを残しておく理由はないであろう．$\psi(x)$ が指数関数的に大きくなる迂回域では，準古典的近似の精度の悪さのために，指数関数的に小さな付加項は消えてしまう．このような項は $\varphi\to-\pi$ では，あるいは指数関数的に大きな項になりうるかもしれないが，そうであれば（物理的境界条件に合わないので，訳者）やはり消え行く運命にある．

この式の第１項は（$x\to-\infty$ で平面波 $\psi\sim e^{ipx/\hbar}$ になる）障壁に入射する波をあらわし，第２項は反射波をあらわす．選ばれた規格化は入射波の流れの密度を１に等しくすることに対応し，したがって量 D ――透過波の流れの密度――は，求めている障壁の透過係数に等しい．この式が適用できるのは，指数関数の引数が大きく，したがって D 自身が小さい場合だけであることを強調しよう[1]．

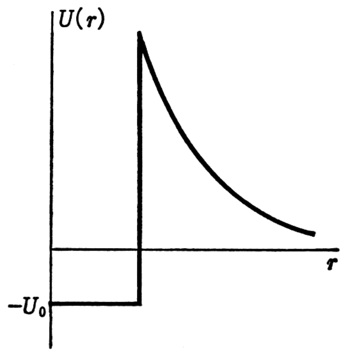
これまでの議論では，場 $U(x)$ は（回帰点のすぐ近傍を除いて）障壁の全領域にわたって準古典性の条件を満足していると仮定してきた．ところが実際には，ポテンシャル・エネルギーの曲線が片側で非常に急であるため，準古典的な近似が適用できないような障壁を扱わなければならないことがしばしばある．D の式の主要な指数関数因子はこの場合，式（50.5）と同じままであるが，指数関数にかかる因子［(50.5) ではこれは１に等しい］は変化する．それを計算するには，原理的には準古典的でない領域における正確な波動関数を計算する必要があり，これと合うように障壁の内部の準古典的な波動関数を決めなければならない．

問　　題

1.　第14図に示すポテンシャル障壁を貫く透過係数を求めよ：ただし $x<0$ では $U(x)=0$，$x>0$ では $U(x)=U_0-Fx$ である；指数関数因子だけを計算すればよい．



第 14 図



第 15 図

1)　D が指数関数的に小さいことは，領域 I において入射波と反射波の振幅が等しいという事実とも関連している．両者の差は指数関数的に小さくて準古典的近似では消失する．

解　簡単な計算の結果次式を得る：

$$D\sim\exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar F}(U_0-E)^{3/2}\right].$$

2.　次のような中心対称のポテンシャルの井戸から（角運動量がゼロの）粒子が脱出する確率を求めよ[1]：$r<r_0$ では $U(r)=-U_0$，$r>r_0$ では $U(r)=\alpha/r$（第15図）．

解　中心対称の問題は1次元の問題に帰着される．したがって上で得られた公式を適用することができて

$$w\sim\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{r_0}^{\alpha/E}\sqrt{2m\left(\frac{\alpha}{r}-E\right)}dr\right]$$

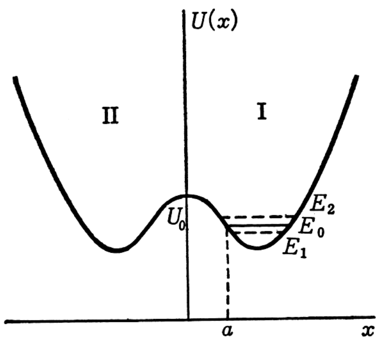
を得る．積分を計算して，最後に

$$w\sim\exp\left\{-\frac{2\alpha}{\hbar}\left[\sqrt{\frac{2m}{E}}\cos^{-1}\sqrt{\frac{Er_0}{\alpha}}-\sqrt{\frac{Er_0}{\alpha}\left(1-\frac{Er_0}{\alpha}\right)}\right]\right\}$$

を得る．$r_0\to0$ の極限では，この式は次のようになる：

$$w\sim\exp\left(-\frac{\pi\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\right)=\exp\left(-\frac{2\pi\alpha}{\hbar v}\right).$$

これらの式が適用できるのは指数関数の肩が大きいとき，つまり $\alpha/\hbar v\gg1$ なるときである．この条件は当然のことながら，クーロン場における運動が準古典的であるための条件（49.11）と一致する．



第 16 図

3.　場 $U(x)$ は障壁によってへだてられた二つの対称な井戸をあらわしている（第16図のIおよびII），もしも障壁が粒子にとって不透過であれば，どちらか一方の井戸の中だけの粒子運動に対応し．また二つの井戸に共通なエネルギー準位が存在する．障壁を透過する遷移の可能性を与えると，これらの各準位は二つの近接した準位に分裂する．これは粒子が同時に二つの井戸の中を運動する状態に対応している．このエネルギー準位の分裂の大きさを決定せよ（場 $U(x)$ は準古典的であると仮定する）．

解　障壁を透過する遷移確率を無視することに対応する，場 $U(x)$ の中でのシュレーディンガー方程式の近似解として，一つの井戸の中で（例えば井戸Iで）（あるエネルギー E_0 をもつ）運動を記述する準古典的な波動関数 $\psi_0(x)$ を用いることにする．この関数はこの井戸の境界の両側で指数関数的に減衰する．関数 $\psi_0(x)$ は，井戸Iの領域で ψ_0^2 の積分が1に等しいように規格化されていると仮定している．トンネル効果の小さ

1)　この問題は，放射性 α 崩壊の理論に関連して，G. A. Gamov (1928) および R. W. Gurney と E. U. Condon (1929) によって初めて考察された．

い確率を考慮すると，準位 E_0 は準位 E_1 および E_2 に分裂する．これらの準位に対応する第ゼロ近似の正しい波動関数は関数 $\psi_0(x)$ および $\psi_0(-x)$ の対称および反対称結合であらわされる：

$$\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x)+\psi_0(-x)], \qquad \psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x)-\psi_0(-x)] \tag{1}$$

井戸 I の領域で関数 $\psi_0(-x)$ は $\psi_0(x)$ に比べて無視できるほど小さく，井戸 II では逆が成り立つ．したがって積 $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ はいたるところで無視できるほど小さく，関数（1）は，その自乗を井戸 I および II にわたって積分すると 1 になるように規格化されている．

シュレーディンガー方程式を

$$\psi_0''+\frac{2m}{\hbar^2}(E_0-U)\psi_0=0, \qquad \psi_1''+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi_1=0$$

と書き，第 1 の式に ψ_1 を掛け，第 2 の式に ψ_0 を掛けて，辺々相引き，x について 0 から ∞ までの区間で積分する．$x=0$ で $\psi_1=\sqrt{2}\psi_0$，$\psi_1'=0$ であること，および

$$\int_0^\infty \psi_0\psi_1 dx \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^\infty \psi_0^2 dx=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

であることを考慮すると

$$E_1-E_0=-\frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0)$$

となることがわかる．

同様にして E_2-E_0 に対しても逆の符号をもつ同じ式を得る．したがって

$$E_2-E_1=\frac{2\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0)$$

となる．

(48.3) の係数を C として，式 (47.1) を用いると

$$\psi_0(0)=\sqrt{\frac{\omega}{2\pi v_0}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^a |p|\,dx\right), \qquad \psi_0'(0)=\frac{mv_0}{\hbar}\psi_0(0)$$

を得る．ここで $v_0=\sqrt{2(U_0-E_0)/m}$ である．したがって

$$E_2-E_1=\frac{\omega\hbar}{\pi}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^a |p|\,dx\right)$$

となる（a はエネルギー E_0 に対応する回帰点である．第16図参照）．

4. 放物線状のポテンシャル障壁 $U(x)=-kx^2/2$ を貫く透過係数 D の正確な値を(それが小さいと仮定しないで）求めよ (E. C. Kemble, 1935)[1]．

解 k と E の値が任意であっても，十分大きい距離 $|x|$ のところで運動は準古典的である．そこでは

$$p=\sqrt{2m\left(E+\frac{1}{2}kx^2\right)}\approx x\sqrt{mk}+E\sqrt{\frac{m}{k}}\frac{1}{x}$$

1) この問題の解は，任意の障壁 $U(x)$ がその極大付近で x の自乗に依存している場合に，その障壁の頂上の十分近くを透過する問題にも適用できる．

であり，シュレーディンガー方程式の解の漸近形は

$$\psi=\text{const}\cdot\xi^{\pm i\varepsilon-1/2}\exp(\pm i\xi^2/2)$$

である．ここで記号

$$\xi=x\left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4},\qquad \varepsilon=\frac{E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}$$

を導入した．

われわれにとって興味がある解は，$x\to+\infty$ で障壁を透過した波，すなわち左から右へ伝播する波のみを含む解である．そこで

$$x\to\infty \text{ では，}\quad \psi=B\xi^{i\varepsilon-1/2}\exp(i\xi^2/2) \tag{1}$$

$$x\to-\infty \text{ では，}\quad \psi=(-\xi)^{-i\varepsilon-1/2}\exp(-i\xi^2/2)+A(-\xi)^{i\varepsilon-1/2}\exp(i\xi^2/2) \tag{2}$$

と置いてみよう．式 (2) の第1項は入射波をあらわし，第2項は反射波をあらわす（波の伝播方向は波の位相が増える方向である）．A と B の間の関係は，漸近式 ψ が複素数 ξ の平面の十分遠方のすべての領域で成り立つことから出発して求めることができる．ξ の上半面を大きな半径 ρ の半円に沿って回ったときの関数 (1) の変化を追跡しよう：

$$\xi=\rho e^{i\varphi},\qquad i\xi^2=\rho^2(-\sin 2\varphi+i\cos 2\varphi).$$

ここで φ は0から π まで変わる．関数 (1) は径路に沿って回ると，関数 (2) の第2項に移行し，その係数は，

$$A=B(e^{i\pi})^{i\varepsilon-1/2}=-iBe^{-\pi\varepsilon} \tag{3}$$

となる．$(\pi/2<\varphi<\pi)$ の径路の部分では，絶対値 $|\exp(i\xi^2/2)|$ は指数関数的に大きく，(2) の第1項にあたる指数関数的に小さい量は失われる[1)]．

入射波の (2) で選ばれた規格化によると，粒子数保存の条件は

$$|A|^2+|B|^2=1 \tag{4}$$

である．

(3) および (4) から，求める透過係数は

$$D=|B|^2=\frac{1}{1+e^{-2\pi\varepsilon}}$$

となる．この式は任意の E に対して成り立つ．もしもエネルギーが負で，その絶対値が大きいと，式 (50.5) と同じく $D\approx e^{-2\pi|\varepsilon|}$ を得る．$E>0$ のとき

$$R=1-D=\frac{1}{1+e^{2\pi\varepsilon}}$$

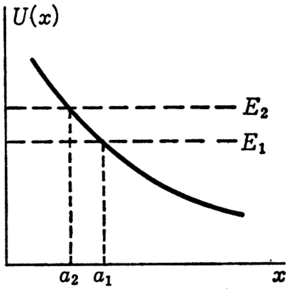
なる量は障壁上方の反射係数である．

---

1) A を決定するために下の半平面を迂回することは適当でない．なぜならば，径路の範囲 $(-\pi<\varphi<-\pi/2)$ で（ここで ψ は式 (2) で与えられる）左端に隣接する（$\varphi=-\pi$ に無限に近い，訳者）部分で $\exp(i\xi^2/2)$ の項は $\exp(-i\xi^2/2)$ の項にくらべて指数関数的に小さいからである．

§ 51. 準古典的行列要素の計算

任意の物理量 f の行列要素を準古典的な波動関数を用いて直接に計算することは非常に困難である．遷移に対する行列要素を計算すべき二つの状態間のエネルギーは互いに離れていて，したがって行列要素が量 f のフーリエ成分に帰着されないと仮定しよう（§48）．この困難さは，波動関数のもつ（大きい虚の指数をもつ）指数関数的性格のために，被積分式が急速に振動する量となることと関連している．



第 17 図

1次元の場合（場 $U(x)$ の中の運動）を考察しよう．そして簡単のために物理量 f の演算子は単純に座標 x の関数であると仮定する．ψ_1 と ψ_2 を粒子のエネルギーのある値 E_1 と E_2 に対応する波動関数であるとしよう（しかも第17図のように $E_2>E_1$ とする）．ψ_1, ψ_2 は実であるように選んだとする．われわれは積分

$$f_{12}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1 f\psi_2 dx \tag{51.1}$$

を計算しなければならない．

(47.5) によれば回帰点 $x=a_1$ の両側の領域で，（回帰点から十分はなれたところで）波動関数 ψ_1 は次の形をとる：

$$\begin{aligned} x<a_1 \text{ では：}\quad \psi_1&=\frac{C_1}{2\sqrt{|p_1|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_{a_1}^{x}p_1 dx\right|\right),\\ x>a_1 \text{ では：}\quad \psi_1&=\frac{C_1}{\sqrt{p_1}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{x}p_1 dx-\frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \tag{51.2}$$

ψ_2 についても（添字1を添字2で置きかえた）同様の式がある．

しかし波動関数に対するこれらの漸近式を (51.1) に代入してこの積分を計算すると，正しくない結果を与えるであろう．問題は次の点にある．すなわち以下で見るように，この積分は指数関数的に小さい量であるにもかかわらず，被積分関数それ自身は小さくないからである．したがって被積分関数が比較的小さい変化をするだけでも，一般的にいって積分の大きさの程度が大きく変わってしまう．この困難は次のようにして避けることができる．

($x>a_2$ なる領域で) 余弦を二つの指数関数の和に分解して，関数 ψ_2 を $\psi_2=\psi_2^++\psi_2^-$ なる和の形にあらわそう．式 (50.2) によれば

$$x<a_2 \text{ では,}\quad \psi_2^+=\frac{C_2}{2\sqrt{|p_2|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_{a_2}^{x}p_2dx\right|\right),$$
$$x>a_2 \text{ では,}\quad \psi_2^+=\frac{C_2}{2\sqrt{|p_2|}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{a_2}^{x}p_2dx+\frac{i\pi}{4}\right) \tag{51.3}$$

となる．関数 ψ_2^- は ψ_2^+ の複素共役である [$\psi_2^-=(\psi_2^+)^*$].

積分 (51.1) もまた二つの複素共役の積分の和に分解されて $f_{12}=f_{12}^++f_{12}^-$ となる．この計算にとりかかろう．まずはじめに気がつくことは積分

$$f_{12}^+=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1 f\psi_2^+dx$$

が収束することである．実際，関数 ψ_2^+ は $x<a_2$ なる領域で指数関数的に増加するけれども，それにかわって関数 ψ_1 が $x<a_1$ なる領域でもっと急速に指数関数的に減少する ($x<a_2$ なる領域ではどこでも $|p_1|>|p_2|$ であるからである).

座標 x を複素変数とみなして，積分路を実軸から上半面に移そう．x に正方向の虚の増加分があると，($x>a_1$ の領域で) 関数 ψ_1 の中には増大する項があらわれるが，それにかわって関数 ψ_2^+ はより急速に減少する．それは $x>a_1$ なる領域ではどこでも $p_2>p_1$ であるためである．したがって被積分関数は減少する．

移された積分路は，準古典的近似をその近傍に適用できないような実軸上の点 $x=a_1, a_2$ をもはや通らない．したがって全径路上で ψ_1 および ψ_2^+ として，上半面上のそれぞれの漸近関数を用いることができる．それは関数

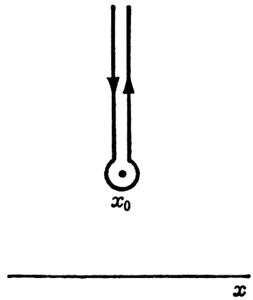
$$\psi_1=\frac{C_1}{2[2m(U-E_1)]^{1/4}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{x}\sqrt{2m(U-E_1)}dx\right),$$
$$\psi_2^+=\frac{C_2}{2[2m(U-E_2)]^{1/4}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{a_2}^{x}\sqrt{2m(U-E_2)}dx\right) \tag{51.4}$$

である．ここで根は実軸上の $x<a_2$ なる領域で正となるように定める．

積分

$$f_{12}^+=\frac{C_1C_2}{4\sqrt{2m}}\int\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{x}\sqrt{2m(U-E_1)}dx\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\hbar}\int_{a_2}^{x}\sqrt{2m(U-E_2)}dx\right)\frac{f(x)dx}{[(U-E_1)(U-E_2)]^{1/4}} \tag{51.5}$$

においてできるだけ指数因子が小さくなるように，積分路を移すことを目標にしよう．この肩の指数は $U(x)=\infty$ なる点にのみ極値をもつ（$E_1 \neq E_2$ であれば，指数の x に関する導関数はそこ以外のいかなる点でもゼロとなることはない）．したがって積分路の上半面上の移動は，関数 $U(x)$ の特異点を迂回する必要性によってのみ制限される．線形微分方程式の一般論により，関数 $U(x)$ の特異点は波動関数 $\psi(x)$ の特異点と一致する．径路の具体的な選び方は場 $U(x)$ の具体的な形に依存する．したがってもしも関数 $U(x)$ が上半面上にただ一つの特異点 $x=x_0$ をもつならば，積分は第18図に示すような形の径路に沿って行なうことができる．積分の中で重要な役割を果たすのは特異点のすぐ近傍なので，求める行列要素 $f_{12}=2\,\mathrm{Re}\,f_{12}^{+}$ は指数関数的に小さくて，次のように書かれる式に大体比例する：



第 18 図

$$f_{12} \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\,\mathrm{Im}\left[\int^{x_0}\sqrt{2m(E_2-U)}\,dx-\int^{x_0}\sqrt{2m(E_1-U)}\,dx\right]\right) \qquad (51.6)$$

（エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау, 1932）[1]．積分の下端としては，古典的に近づき得る領域内の任意の点を選ぶことができる．明らかに，その具体的選び方は積分の虚数部分に影響を与えない．もしも関数 $U(x)$ が上半面上にいくつかの特異点をもつならば，(51.6) の x_0 としては指数関数の肩が絶対値で最小の値をとるものを選ばなければならない[2]．

中心対称場の中の運動に対する準古典的行列要素の計算も，同じ方法で行なうことができる．しかしこの場合には $U(r)$ として有効ポテンシャル・エネルギー（ポテンシャル・エネルギーと遠心エネルギーの和）を考えるべきである．したがって l の値が異なる状態ではそれは異なったものとなるであろう．ここで述べる方法をあとで適用することを考慮して，二つの状態における有効ポテンシャル・エネルギーを一般的な形に $U_1(r)$ および $U_2(r)$ と書いておこ

1) 式 (51.5) と (51.6) を導くときにわれわれが行なった，波動関数をその漸近式で置きかえることは正当である．なぜなら第18図に示す径路に沿った積分の大きさの程度は，被積分関数の大きさの程度によって決められており，したがって後者の比較的小さな変化ならば積分値に重大な影響を与えないからである．

2) 量 $f(x)$ それ自身は特異点をもたないと仮定する．

う．すると（51.5）の被積分関数の中の指数因子の肩は，$U_1(r)$ または $U_2(r)$ が無限大となる点ばかりでなく

$$U_2(r)-U_1(r)=E_2-E_1 \tag{51.7}$$

となる点でも極値をもつ．したがって式

$$f_{12}\sim\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\,\mathrm{Im}\left[\int^{r_0}\sqrt{2m(E_2-U_2)}\,dr-\int^{r_0}\sqrt{2m(E_1-U_1)}\,dr\right]\right) \tag{51.8}$$

において，r_0 の値の候補としては，$U_1(r)$ および $U_2(r)$ の特異点ばかりでなく，方程式（51.7）の根も考えなければならない．

中心対称の場合は，（51.1）の r についての積分は（$-\infty$ からではなく）0から $+\infty$ までの区間で行なわれるという点でも異なっている：

$$f_{12}=\int_0^\infty \chi_1 f\chi_2 dr.$$

この点に関連して二つの場合を区別しなければならない．もしも被積分式が r の偶関数であれば，積分は形式的に $-\infty$ から $+\infty$ までのすべての領域に広げることができて，前の場合と異なるところは何もない．このような場合は，$U_1(r)$ と $U_2(r)$ が r の偶関数 $[U(-r)=U(r)]$ であると起こる．このときには波動関数 $\chi_1(r)$ と $\chi_2(r)$ は偶あるいは奇関数である（§21参照）[1]．もしも関数 $f(r)$ もまた偶か奇であると，積 $\chi_1 f\chi_2$ は偶関数となることができる．

もしも被積分関数が偶関数でなければ（$U(r)$ が偶関数でなければ，これはいつも起こっている），積分路の原点は点 $r=0$ から移すことができず，（51.8）の中で候補に上る r_0 の値には $r_0=0$ なる値も含めなければならない．

問　　題

1.　場 $U=U_0e^{-\alpha x}$ における準古典的行列要素を計算せよ（指数因子だけでよい）．

解　$U(x)$ は $x\to-\infty$ のときに限って無限大となる．これに応じて（51.6）の中で $x_0=-\infty$ と置こう．積分は $+\infty$ まで延長することができる．二つの積分はそれぞれ別別では下端 $-\infty$ で発散する．したがってまずそれらの積分を $-x$ から $+\infty$ までの区間で計算し，そのあとで $x\to\infty$ の極限へ移行しよう．その結果

$$f_{12}\sim\exp\left[-\frac{\pi m}{\alpha\hbar}(v_2-v_1)\right]$$

---

1)　$U(r)$ が偶関数のとき，動径波動関数 $R(r)$ は l が偶数（奇数）のとき偶（奇）関数である．このことは r の小さいところでの $R(r)$ の振舞い（$R\sim r^l$）から明らかである．

を得る．ここで $v_1=\sqrt{2E_1/m}$, $v_2=\sqrt{2E_2/m}$ は無限遠（$x\to\infty$）における粒子の速度である．そこでは粒子の運動は自由運動になる．

2. 同様にクーロン場 $U=\alpha/r$ において，$l=0$ なる状態間の遷移について計算せよ．

解 点 $r=0$ が関数 $U(r)$ のただ一つの特異点である．これに対応する積分は§50の問題2において計算した．その結果，式（51.8）により

$$f_{12}\sim\exp\left[\frac{\pi\alpha}{\hbar}\left(\frac{1}{v_2}-\frac{1}{v_1}\right)\right]$$

を得る．

§ 52. 準古典的な場合の遷移確率

ポテンシャル障壁の透過は，古典力学ではまったく不可能な過程の例である．準古典的な場合には，このような過程の確率は指数関数的に小さい．これに対応する指数関数の指数は次のようにして決めることができる．

任意の系のある状態から他の状態への遷移を考えて，対応する古典的な運動方程式を解き，遷移の《軌道》を求めよう．ところがこれは，古典力学では起こりえない過程であることに対応して，複素数であることがわかる．とくに系がある状態から他の状態へ形式的な遷移を起こす《遷移点》q_0 は一般に複素数であることがわかる．この点の位置は古典的な保存則によって決められる．さらに，ある出発点 q_1 から《遷移点》q_0 までは第1の状態にあり，つぎに q_0 から最終位置 q_2 までは第2の状態にある系の運動の作用 $S_1(q_1, q_0)+S_2(q_0, q_2)$ を計算しよう．すると求める過程の確率は公式

$$w\sim\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\operatorname{Im}\left[S_1(q_1, q_0)+S_2(q_0, q_2)\right]\right\} \qquad (52.1)$$

によって決定される．

もしも《遷移点》の位置が一義的でなければ，それらのうちから（52.1）の指数が絶対値で最小になるものを選ばなくてはならない［もちろんそれと同時にこの値は式（52.1）が一般に成り立つほど十分大きくなくてはならない］[1]．

式（52.1）は前節で得られた準古典的な行列要素の計算の規則に相当するものであることがわかる．しかし，このような種類の遷移確率の指数因子にかかる係数を，対応する行列要素の絶対値の自乗によって計算するのは正しくない

1) もしも系のポテンシャル・エネルギー自身が特異点をもっていると，これらの点もまた q_0 の候補の値のうちに含めなければならない．

ことを強調しておかなければならない．

式 (52.1) に基づく**複素古典軌道**の方法は一般的な性格を持っており，任意の自由度をもつ系における遷移にも適用できる (エリ・デ・ランダウ Л.Д. Ландау, 1932). もしも遷移点が実であるが，古典的に到達不可能な領域にあるならば，式 (52.1) は (もっとも簡単な1次元運動の場合には) ポテンシャル障壁を透過する確率に対する表式 (50.5) に一致する．

障壁上方の反射

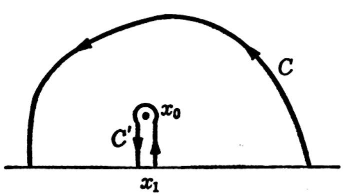
障壁上方の反射――障壁の高さを上回るエネルギーをもつ粒子の反射――の1次元問題に (52.1) を適用しよう．この場合には粒子がその運動の方向を逆に変える《停留点》の複素座標 x_0，つまり方程式 $U(x)=E$ の複素根を q_0 とみなければならない．このような場合にどのようにしたら反射係数を，しかもよい精度で――指数関数につく係数まで含めて――計算することができるかを示そう．

われわれは (§50と同じく) ふたたび障壁より右側遠方の波動関数(透過波) と左側遠方の波動関数 (入射波＋反射波) の間の対応をつけなければならない．これは ψ を複素変数 x の関数とみなして，§47, §50で用いたのと同様な方法で，容易に行なうことができる．

透過波を次の形に書こう：

$$\psi_+=\frac{1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x}pdx\right)$$

(ここで x_1 は実軸上の任意の点である)．そして回帰点 x_0 を (十分遠くで) 囲む径路 C に沿って上半面を回るときに，その値がどのように変化するかを追跡しよう (第19図)．この径路の終りの全部分は，それに沿った入射波の近似的 (準古典的な) 波動関数の誤差が，求める小さな量 ψ_- よりも小さくなるように，十分に遠い左側の領域を通らなければならない．点 x_0 のまわりを回ると平方根 $\sqrt{E-U(x)}$ の符号が変わり，したがって実軸上に戻ると，関数 ψ_+ は左へ伝播する波 ψ_- つまり反



第 19 図

射波に移行する[1]．入射波および透過波の振幅は同じであるとみなすことができるので，求めている反射係数 R は簡単に ψ_- および ψ_+ の絶対値の自乗の比によって与えられる：

$$R=\left|\frac{\psi_-}{\psi_+}\right|^2=\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\operatorname{Im}\int_C p\,dx\right). \tag{52.2}$$

この式が得られてしまえば，指数の中の積分路を勝手に変更することができる．もしも径路を第19図に示す径路 C' に変えると，積分 $\int p\,dx$ は x_1 から x_0 までの径路に沿った積分の2倍になり

$$R=e^{-4\sigma(x_1,x_0)/\hbar},\qquad \sigma(x_1,x_0)=\operatorname{Im}\int_{x_1}^{x_0}p(x)\,dx \tag{52.3}$$

を得る．全実軸上で関数 $p(x)$ は実なので，x_1 の選び方は重要でない．(52.3) における指数関数の前の係数は1に等しいことに注意しよう（ヴェ・エリ・パクロフスキー В. Л. Покровский, エス・カ・サヴィニフ С. К. Саввиных, エフ・エル・ウリニッチ Ф. Р. Улинич, 1958)[2]．

すでに指摘したように，x_0 のすべての可能な値のうちから，(52.3) の指数が絶対値で最小値をとるものを選ばなければならない（しかもこの値は1に比べて十分大きくなければならない)[3]．また，ポテンシャル・エネルギー自身が上半面上に特異点をもてば，その特異点のために積分 $\sigma(x_1, x_0)$ は大きな値になると暗黙のうちに仮定している［そうでない場合には，特異点が指数の値を決定するとしても，指数関数にかかる係数は，もはや (52.3) と同じではないだろう］．もしも $U(x)$ が上半面のどこかで無限大になるならば，この仮定は，エネルギー E が増加すれば必ずどこかで破られる：$U=E$ なる点 x_0 が $U=\infty$ なる点 x_∞ に十分に接近して，両者の反射係数への寄与が同程度（積分 $\sigma(x_\infty, x_0)\sim 1$）となり，式 (52.3) が適用できなくなる時がやってくる．E が十分大きくて，この積分が1にくらべて小さくなる極限では，摂動論が適用できるようになる（問題2参照)[4]．

---

1) 点 x_0 の下を通る径路に沿って（たとえば単に実軸自身に沿って）回ると，関数 ψ_+ は入射波に移る．

2) この結果のここに記した導き方はエリ・デ・ランダウ (1961) による．

3) もちろん $\sigma>0$ となる点 x_0，すなわち上半面上にある点のみを考えるべきである．

4) 中間の場合はヴェ・エリ・パクロフスキーおよびイ・エム・ハラトニコフによって研究された (ЖЭТФ, 40, 1713 (1961)).

問　　題

1. 指数関数的精度をもつ準古典的近似により，クーロン場の固定した中心と見なされる重い核との衝突における重陽子の崩壊確率を求めよ（イェ・エム・リフシッツ E. M. Лифшиц, 1939).

解 反応の確率への最大の寄与をなすのは，軌道角運動量がゼロの衝突である．準古典的近似では，これは《正面》衝突であり，粒子の運動は1次元運動に帰着する．

重陽子の中の陽子と中性子の結合エネルギー ε を単位として測った重陽子のエネルギーを E としよう．（同じ単位で測った）自由になった中性子と陽子のエネルギーを E_n と E_p としよう．また（Ze を核の電荷として）無次元の座標 $q=r/(Ze^2/\varepsilon)$ を導入し，《遷移点》における，すなわち重陽子の《崩壊の瞬間》におけるその値を（一般的には複素数であるが）q_0 と書こう．E_n, E_p, E を次の形であらわす：

$$E_n=\frac{v_n^2}{2},\quad E_p=\frac{v_p^2}{2}+\frac{1}{q_0},\quad E=v_d^2+\frac{1}{q_0}. \tag{1}$$

ここで v_n, v_p, v_d は（m を核子の質量として）$\sqrt{\varepsilon/m}$ を単位として測った，崩壊の瞬間における粒子の《速度》である．v_n は実であり，自由になった中性子の速度に等しいが，v_p と v_d は複素数である．遷移点におけるエネルギーと運動量の保存条件は

$$E_p+E_n=E-1,\qquad v_p+v_n=2v_d \tag{2}$$

であるから，これから

$$v_p=2i+v_n,\quad v_d=i+v_n,\quad \frac{1}{q_0}=E+1-v_n^2+2iv_n$$

を得る．遷移前までの系の作用は，崩壊点までの核の場の中での重陽子の運動に対応する．その虚数部分は：

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} S_1&=Ze^2\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}\operatorname{Im}\int_\infty^{q_0}\sqrt{4\left(E-\frac{1}{q}\right)}dq\\&=Ze^2\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}\operatorname{Im}\left\{2q_0v_d-\frac{2}{\sqrt{E}}\cosh^{-1}\sqrt{q_0E}\right\}.\end{aligned} \tag{3}$$

遷移後の作用は，崩壊点からの中性子と陽子の運動に対応する：

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} S_2&=Ze^2\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}\operatorname{Im}\left\{\int_{q_0}^\infty v_n dq+\int_{q_0}^\infty\sqrt{2\left(E_p-\frac{1}{q}\right)}dq\right\}\\&=Ze^2\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}\operatorname{Im}\left\{-v_nq_0-v_pq_0+\sqrt{\frac{2}{E_p}}\cosh^{-1}\sqrt{q_0E_p}\right\}.\end{aligned} \tag{4}$$

(52.1) により，この過程の確率は

$$w\backsim\exp\left\{-\frac{2Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}\operatorname{Im}\left[\sqrt{\frac{2}{E_p}}\cosh^{-1}\sqrt{q_0E_p}-\frac{2}{\sqrt{E}}\cosh^{-1}\sqrt{q_0E}\right]\right\} \tag{5}$$

である．角括弧の中の第1と第2の $\cosh^{-1}$ の項が (4) および (3) から生じていることに相応して，それらの虚部の符号はそれぞれ $\operatorname{Im} v_p$ および $\operatorname{Im} v_d$ の符号と同じでなければならない（後の二者の符号は，方程式 (2) を解くとき結果として $\operatorname{Im}(S_1+S_2)>0$ となるように選ばれる).

w は E_n に指数的に依存するから，(E_n および $E_p=E-1-E_n$ のすべての値をふくむ)全崩壊確率は，指数関数の指数の E_n の関数としての（絶対値の）最小値によって決められる．解析の結果，この値は $E_n\to 0$ のときに実現されることがわかる．この場合 $q_0=1/(E+1)$ であり，(5) より

$$w\backsim\exp\left\{-\frac{2Ze^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}\left[\sqrt{\frac{2}{E-1}}\cos^{-1}\sqrt{\frac{E-1}{E+1}}-\frac{2}{\sqrt{E}}\cos^{-1}\sqrt{\frac{E}{E+1}}\right]\right\}$$

となる．この式の適用条件は，指数関数の引数が（1にくらべて）大きい値となることである．ゼロでない E_n の値に対して作用 $S=S_1+S_2$ の虚部を計算すると，自由になった粒子のエネルギー分布を求めることができる．値 $E_n=0$ の近くでは

$$\mathrm{Im}\,S(E_n)-\mathrm{Im}\,S(0)\approx E_n\left(\frac{d\,\mathrm{Im}\,S}{dE_n}\right)_{E_n=0}$$

となる[1]．微係数を計算すると次の結果を得る：

$$\frac{dw}{dE_n}\backsim\exp\left\{-\frac{2Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}E_n\left[\frac{3-E}{(E-1)(E+1)^2}+\frac{1}{\sqrt{2(E-1)^3}}\cos^{-1}\sqrt{\frac{E-1}{E+1}}\right]\right\}.$$

2. 粒子のエネルギーが摂動論を適用できるほど高いとき，障壁上方の反射係数を求めよ．

解　解は式(43.1)で与えられる．この式で始状態と終状態の波動関数は，反対方向に伝播する平面波であって，前者は流れの密度が1となるように，後者は $2\pi\hbar$ で割った運動量を引数とする δ-関数によって，規格化されている．いまの場合，p' を反射後の運動量とすれば，$d\nu=dp'/2\pi\hbar$ である．(43.1) の中で（δ-関数の存在を考慮して）p' に関する積分を行なうと

$$R=\frac{m^2}{\hbar^2p^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}U(x)e^{2ipx/\hbar}dx\right|^2 \tag{1}$$

を得る．この式は摂動論の適用条件 $Ua/\hbar v\ll 1$［ここで a は障壁の幅(187頁の (45.6) 参照)］が満足され，同時に $pa/\hbar\lesssim 1$ であるならば正しい．このあとの条件は $R(p)$ の依存性が指数関数的でないことを保証するものである．この条件がみたされない場合には式(1) の適用性の問題はさらにつっこんだ研究を必要とする．

3. 関数 $U(x)$ が $x=x_0$ に折れ目をもつ場合に，準古典的な障壁による障壁上方の反射係数を求めよ．

解　もしも関数 $U(x)$ が実の x 上で何らかの特異点をもてば，反射係数は主としてこの点の近傍の場で決定され，それを計算するために型通りに摂動論を適用することができる．このときすべての x において摂動論の適用性の条件が守られる必要はない；準古典性の条件が満たされれば十分である．すると問題2の（1）と同じだが，入射粒子の運動量のかわりに $x=x_0$ における関数 $p(x)$ の値を入れなければならない点だけが異なる式に到達する．

この場合折れ目の点を $x=0$ の点に選ぶと，その点の近傍では異なる F_1 および F_2 を用

1) 関数 $\mathrm{Im}\,S(E_n)$ は $E_n=0$ にカスプ状の点をもち，その両側の正および負の E_n の方向に増大する（$E_n<0$ なる値は核による中性子の捕獲に対応する）．

いて

$$x>0 \text{ では,} \quad U=-F_1x, \qquad x<0 \text{ では,} \quad U=-F_2x$$

となる．x に関する積分は，被積分関数に減衰因子 $e^{\pm\lambda x}$ を導入して行なう（積分のあとで $\lambda\to 0$ とする）．その結果

$$R=\frac{m^2\hbar^2}{16p_0^6}(F_2-F_1)^2$$

を得る．ここで $p_0=p(0)$ である．

§ 53. 断熱的摂動による遷移

すでに§41において，時間とともに限りなくゆっくりと変化する摂動の極限では，一つの状態から他の状態へ系が遷移する確率はゼロとなることを述べた．ここでは，ゆっくり変化する(断熱的)摂動による遷移確率を計算することで，この問題を定量的に考察しよう（エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау, 1961).

系のハミルトニアンをゆっくり変化する時間の関数とし，$t\to\pm\infty$ で一定の極限に収束するとしよう．さらに $\psi_n(q,t)$ および $E_n(t)$ を，シュレーディンガー方程式 $\hat{H}(t)\psi_n=E_n\psi_n$ を解いて得られる（パラメーターとしての時間に依存する）固有関数および固有値としよう．$\hat{H}$ の時間変化の断熱的性質のために，E_n および ψ_n の時間依存性もゆるやかである．目下の問題は，$t\to-\infty$ において系が状態 ψ_1 にあったとき，$t\to+\infty$ において系がある状態 ψ_2 に見いだされる確率 w_{21} を求めることである．

摂動がゆっくりであることにより，《遷移過程》の継続時間は長く，したがってこの時間内の作用の変化 $\left(\text{それは積分 } -\int E(t)dt \text{ で与えられる}\right)$ は大きい．この意味でとりあげている問題は準古典的な性格をもち，求めている遷移確率を定めるにあたっては

$$E_1(t_0)=E_2(t_0) \tag{53.1}$$

となる時刻の値 $t=t_0$ が重要な役割を果たす．これはあたかも古典力学における《遷移時刻》に対応している（§52と比較)．もちろん実際には，このような遷移は方程式（53.1）の根が複素数になることにあらわれているように，古典的には不可能である．これに関連して，エネルギーの二つの固有値が等しくなる時点 $t=t_0$ の近傍においてパラメーター t が複素数のときのシュレーディンガー方程式の解の性質を研究することが必要となる．

以下で見るように，この点の近傍では固有関数 ψ_1, ψ_2 は強く t に依存している．この依存性を決定するためには，あらかじめそれらの線形結合(それを φ_1, φ_2 と名づける）をつくり，条件

$$\int\varphi_1^2 dq=\int\varphi_2^2 dq=0, \qquad \int\varphi_1\varphi_2 dq=1 \tag{53.2}$$

を満足するようにしよう．これはいつも（t の関数である）複素係数を適当に選ぶことによって可能である．関数 φ_1, φ_2 はもはや $t=t_0$ で特異性をもたない．

こんどは固有関数を線形結合

$$\psi=a_1\varphi_1+a_2\varphi_2 \tag{53.3}$$

の形に求めよう．このとき《時刻》t が複素数になると，それに依存する演算子 $\hat{H}((t)$ [(17.4) の形をしている] は依然としてその転置演算子に等しい($\hat{H}=\tilde{\hat{H}}$) が，もはやエルミートではなくなる（$\hat{H}\neq\tilde{\hat{H}}^*$）ことに注意すべきである；ポテンシャル・エネルギーが $U(t)\neq U(t)^*$ となるためである．

シュレーディンガー方程式に (53.3) を代入し，左から φ_1 または φ_2 を掛け，q に関して積分する．記号

$$H_{ik}(t)=\int\varphi_i\hat{H}\varphi_k dq \tag{53.4}$$

を導入し，上述のハミルトニアンの性質により，$H_{12}=H_{21}$ であることを考慮すると，次の連立方程式を得る：

$$\begin{aligned} H_{11}a_1+H_{12}a_2&=Ea_2,\\ H_{12}a_1+H_{22}a_2&=Ea_1. \end{aligned} \tag{53.5}$$

この連立方程式が解をもつ条件により，方程式 $(H_{12}-E)^2=H_{11}H_{22}$ が得られ，この根はエネルギーの固有値を決定する：

$$E=H_{12}\pm\sqrt{H_{11}H_{22}}. \tag{53.6}$$

そうすると (53.5) により

$$\frac{a_2}{a_1}=\pm\sqrt{\frac{H_{11}}{H_{22}}} \tag{53.7}$$

を得る．

(53.6) からわかるように，点 $t=t_0$ で二つの固有値が一致するためには，その点で H_{11} または H_{22} がゼロとならなければならない．それを H_{11} としよう．一般的にいって正則点での関数のゼロへの近づき方は $t-t_0$ に比例する．した

がって

$$E(t)-E(t_0)=\pm\mathrm{const}\cdot\sqrt{t-t_0}. \tag{53.8}$$

すなわち $E(t)$ は $t=t_0$ に分岐点をもつ．このときにはまた $a_2\sim\sqrt{t-t_0}$ である．したがって点 $t=t_0$ にはただ一つの固有関数があって，φ_1 に等しい．

ここまでくるといまとりあげている問題は，§52で考察した障壁上方の反射の問題と形式的に全く同じことがわかる．ここでは（§52の座標に関して準古典的な関数にかわって）《時間に関して準古典的な》波動関数 $\Psi(t)$ を問題にするわけである．そして $t\to-\infty$ で波動関数が $\Psi(t)=\psi_1\exp(-iE_1t/\hbar)$ のとき，$t\to+\infty$ において波動関数の中の $c_2\psi_2\exp(-iE_2t/\hbar)$ なる形の項を決定することが要求されている（これは $x\to+\infty$ における透過波から $x\to-\infty$ における反射波を決定する問題と類似している）．求める遷移確率は $w_{21}=|c_2|^2$ である．このとき作用 $S=-\int E(t)dt$ は，複素分岐点をもつ関数の時間に関する積分であらわされる $\left(\text{これは積分}\int p\,dx\text{ の中の関数 }p(x)\text{ が複素分岐点をもつことと同じである}\right)$．したがって考察している問題は，複素変数 t の平面上で（大きな負の値から大きな正の値への）迂回路を用いて解くことができる．これは§52で変数 x の平面上でなされたこととまったく同様である．したがって，ここではその議論をくり返さないことにする．

実軸上では $E_2>E_1$ と考えよう．すると迂回は複素数 t の上半面で（比 $\exp(-iE_2t/\hbar)/\exp(-iE_1t/\hbar)$ が増加するように変位させて）行なうべきである．その結果［式（52.2）と類似の］次式を得る：

$$w_{21}=\exp\left(\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\int_{C'}E(t)dt\right) \tag{53.9}$$

ここで積分は第19図に示す径路に沿って（左から右へ向かって）行われる．

この径路の左の分岐点では $E=E_1$ であり，右の分岐点では $E=E_2$ である．したがって（53.9）は次の形に書きかえることができる：

$$w_{21}=\exp\left(-2\,\mathrm{Im}\int_{t_1}^{t_0}\omega_{21}(t)dt\right). \tag{53.10}$$

ここで $\omega_{21}=(E_2-E_1)/\hbar$，$t_1$ は t の実軸上の任意の点であり，また t_0 としては上半面にある方程式（53.1）の根のうち（53.10）の指数関数の引数の絶対値

を最小にするものをとらなければならない[1]．それればかりでなく，状態1から状態2への直接の遷移の他に，いろいろな中間状態を通る《遷移の道》もまた可能であり，その確率は類似の式であらわされる．たとえば1→3→2の《道》に沿った遷移に対しては，(53.10) の中の積分は

$$\int^{t_0^{(31)}} \omega_{31}(t)dt+\int^{t_0^{(23)}} \omega_{23}(t)dt$$

なる積分の和で置きかえられる．これらの積分の上端には，それぞれ項 $E_1(t)$, $E_3(t)$ および $E_2(t), E_3(t)$ の《交点》が当てられる．この結果は，これらの両方の複素点を囲む径路に沿って回ることにより得られる[2]．

1) 候補とすべき t_0 の値の中には，$E(t)$ が無限大となる点をも考慮に入れなければならない［しかしこのような点に対しては，(53.9) の指数関数にかかる係数は1とは違ったものになるだろう］.

2) 中間状態が連続スペクトルに属する場合には，特別の考察が必要である．

第8章　スピン

§ 54. スピン

古典力学の場合と同じように，量子力学の場合にも，閉じた系では，空間の等方性の結果として，角運動量の保存則が生まれる．ここには角運動量と回転対称性との関連性がはやくもあらわれている．しかし量子力学では，この関連性はとくに深まって，事実上，角運動量という概念の基本的内容を成すこととなる．それは，粒子の角運動量をベクトル積 $[\boldsymbol{rp}]$ とする古典的定義が，動径ベクトルと運動量の同時測定不可能性のために，量子力学では意味を失ってしまうためである．

§ 28 で見たように，l と m の値を与えると，粒子の波動関数の角度依存性が決まり，それと同時に，それの回転に対する対称性が決まる．最も一般的な形でこの対称性を定式化すると，座標系の回転に対する波動関数の変換則の形になる．

（角運動量 L とその投影 M の値が与えられた）粒子系の波動関数 ψ_{LM} は，z 軸のまわりに座標系を回転する場合にかぎって不変である[1]．z 軸の方向が変わるような回転があれば，それがどのような回転であれ，角運動量の z 軸上への投影は，もはや確定値をとらなくなる．これは，新しい座標軸では，一般に，新しい波動関数は（L を与えたときに）可能な $2L+1$ 個の異なる M の値に対応する関数の重ね合せ（線形結合）になる，ことを意味している．座標系の回転を行なうと，$2L+1$ 個の関数 ψ_{LM} は相互に変換される，と言ってもよい[2]．この変換の法則，すなわち，（座標軸の回転角の関数としての）重ね合せの係数は，L の値を与えると完全に決まる．したがって，角運動量は，系の状

1) 重要でない位相因子を除いて．

2) 数学用語を使えば，これらの関数は，いわゆる回転群の**既約表現**を成している．相互に変換される関数の数は表現の**次元**と呼ばれ，しかも，この数は，これらの関数の線形結合をどのように選んでも，減らすことができない，と仮定しよう．

態を座標系の回転に対する変換性によって分類する量子数の意味をもつことになる．量子力学から見た角運動量の概念のこの側面は，それが波動関数のあらわな角度依存性には直接関係していない点で，すなわち，波動関数の相互変換則は，角度依存性に頼らなくても，それ自身で定式化できるということで，とくに重要である．

全体として静止していて，一定の内部状態にある複合粒子(たとえば原子核)を考えよう．この粒子は一定の内部エネルギーの他に，その内部での粒子の運動に基づく，大きさがLに定まった角運動量をもっている．この角運動量は空間の中で$2L+1$個の異なる方位をとることができる．言いかえれば，複合粒子の全体としての運動を考察する場合には，それの位置座標とともに，一つの離散的変数，すなわち，空間のある選ばれた方向への内部角運動量の投影，を書き加える必要がある．

しかも，角運動量の意味を上述のように理解する場合には，角運動量の出所・起原は重要な問題にはならない．そして，粒子が《複合》であるか《素》であるかに無関係に自然な形で，粒子に付与すべき《固有》角運動量の概念に到達するのである．

したがって，量子力学では，素粒子に，その空間内の運動と関係のない，ある《固有》角運動量を付与することになる．素粒子のこの性質は専ら量子的なものであり（$\hbar\to 0$ の極限では消えてしまう）．したがって，古典的解釈を原理的に許さないものである[1]．

粒子の固有角運動量は，**軌道角運動量**と呼ばれる粒子の空間運動に伴う角運動量と区別するため，**スピン**と呼ばれている[2]．素粒子だけでなく，複合粒子であっても（たとえば，原子核のように），それが考察している現象の範囲では素粒子のように振舞う粒子であれば，同じようにいってよい．（軌道角運動量と同じく$\hbar$を単位にしてはかった）粒子のスピンをsであらわすことにしよう．

1）とくに，素粒子の《固有》角運動量を《自分自身の軸の回りの》回転に由来すると考えるのは，まったく意味がない．

2）電子に固有角運動量があるという物理的着想は，ウーレンベック，ハウトスミットによって出された (G. Uhlenbeck, S. Goudsmit, 1925)．スピンはパウリによって量子力学へ導入された (W. Pauli, 1927)．

スピンをもつ粒子では，波動関数による状態の記述は，粒子の空間内の位置の確率のみならず，スピンの可能な向きの確率まで決定するものでなければならない．換言すれば，波動関数は3つの連続的な変数——粒子の位置座標の他に，空間のある選ばれた方向（z 軸）への投影を意味し有限個の離散値（これを以下では文字 σ で表わす）をとる一つの離散的な**スピン変数**にも依存しなければならない．$\psi(x, y, z;\ \sigma)$ をこのような波動関数としよう．実際には，それは σ の異なる値に対応する数個の異なる座標関数の組で表わされる．これらの関数のことを波動関数の**スピン成分**と呼ぶことにしよう．この場合，積分

$$\int|\psi(x, y, z;\ \sigma)|^2 dV$$

は粒子が確定値 σ をとる確率を与える．また粒子が体積要素 dV のなかに入り，σ の値は任意でよい確率は $dV\sum_\sigma|\psi(x, y, z;\ \sigma)|^2$ である．

量子力学的スピン演算子は，波動関数に作用させると，もちろん《スピン変数》に働く．いいかえれば，それはある方式に従って波動関数の一つの成分を他の成分へと変換する．この演算子の形は以下で決めることになる．しかしもっとも一般的な考察を加えるだけでも，演算子 $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ が軌道角運動量演算子と同じ交換関係を満たすことを容易に確かめることができる．

角運動量演算子は基本的には無限小回転の演算子と同じものである．§26 で軌道角運動量演算子の表式を導いたときには，われわれは座標の関数に回転演算子を作用させてその結果を見た．スピン角運動量の場合には，スピン演算子が働くのは座標ではなく《スピン変数》であるため，このような導き方は意味を失ってしまう．それゆえ求める交換関係を得るためには，無限小回転の演算を一般的な形で座標系の回転として考察しなければならない．無限小回転を順次に x 軸と y 軸の回りに行ない，そのあとでこれと同じ軸の回りに逆の順序でそれを行なうと，直接の計算から容易にわかるように，これら二つの演算の差は，z 軸の回りに（x 軸と y 軸の回りの回転角の積に等しい角度だけ）無限小回転することと同等である．ここではこの簡単な計算を行なうことはしないが，結局は角運動量成分の演算子の間にふたたび通常の交換関係が得られる．したがって，それは当然スピン演算子に対しても成り立つはずである：

$$\{\hat{s}_y, \hat{s}_z\} = i\hat{s}_x, \qquad \{\hat{s}_z, \hat{s}_x\} = i\hat{s}_y, \qquad \{\hat{s}_x, \hat{s}_y\} = i\hat{s}_z. \tag{54.1}$$

またこれから導かれるすべての物理的帰結も同様に成り立たなければならない.

交換関係 (54.1) からスピンの絶対値と成分のとり得る値を定めることができる. §27 で導いたすべての結論 (公式 (27.7)-(27.9)) は, 交換関係だけに基づくものであるから, 本節にも完全に適用できる. これらの公式の中の $\boldsymbol{L}$ を $\boldsymbol{s}$ と考えるだけでよい. 公式 (27.7) から, スピンの z 成分の固有値は公差が 1 の数列をつくることが導かれる. しかし今度はスピンの z 成分の値を軌道角運動量の成分 L_z のように, 整数であると主張はできない (§27 のはじめに導いた結論はここには適用できない. なぜならば, それは軌道角運動量に特有な演算子 $\hat{l}_z$ の表式 (26.14) に基づいているからである).

さらに s_z の固有値の数列は絶対値が等しくて符号が反対のある値によって上下を限られている. これを $\pm s$ であらわすことにしよう. s_z の最大値と最小値の差 $2s$ は整数かゼロでなければならない. したがって, 数 s は値 0, 1/2, 1, 3/2, … をとることができる.

同じくスピンの自乗の固有値は

$$\boldsymbol{s}^2=s(s+1) \tag{54.2}$$

に等しい. ここで s は (ゼロを含む) 整数あるいは半整数である. s を与えるとスピンの成分 s_z は全部で $2s+1$ 個の値 $s, s-1, \cdots, -s$ をとることができる. これに対応して, スピン s をもつ粒子の波動関数は $2s+1$ 個の成分をもつことになる[1].

経験の示すところによれば, 大部分の素粒子——電子, 陽電子, 陽子, 中性子, μ 中間子およびすべてのハイペロン (Λ, Σ, Ξ)——は 1/2 のスピンをもっている. このほかにゼロ・スピンをもつ素粒子——π 中間子と K 中間子——がある.

粒子の全角運動量は軌道角運動量 $\boldsymbol{l}$ とスピン $\boldsymbol{s}$ から合成される. これらの演算子は全く異なる変数の関数に作用するので, もちろん互いに交換する.

全角運動量

---

1) s は粒子の種類によってそれぞれ決まった数なので, 古典力学への極限移行($\hbar\to 0$)を行なうと, スピン角運動量はゼロになる. 軌道角運動量の場合には, l は任意の値をとることができるから, 上のような考え方は意味がない. 古典力学への移行は, 積 $\hbar l$ を有限に置いたまま, $\hbar$ をゼロに, そして, l を無限大に, 同時に, もっていくことに対応している.

$$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s} \tag{54.3}$$

の固有値は，2個の異なる粒子の軌道角運動量の和と同じように，《ベクトル模型》の規則（§31）によって決められる．すなわち l と s の値を与えれば，全角運動量は $l+s, l+s-1, \cdots, |l-s|$ という値をとることができる．したがって軌道角運動量 l がゼロでない電子（スピンは1/2）では，全角運動量は $j=l\pm1/2$ に等しい．また $l=0$ の場合には全角運動量はもちろんたった一つの値 $j=1/2$ をとる．

粒子系の全角運動量演算子 $\boldsymbol{J}$ は，その中の各粒子の角運動量演算子 $\boldsymbol{j}$ の和に等しい．したがってその値はやはりベクトル模型の規則によって決められる．角運動量 $\boldsymbol{J}$ は次の形にあらわすことができる：

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}, \qquad \boldsymbol{L}=\sum_a \boldsymbol{l}_a, \qquad \boldsymbol{S}=\sum_a \boldsymbol{s}_a. \tag{54.4}$$

ここで $\boldsymbol{S}$ は系の全スピン，$\boldsymbol{L}$ は系の全軌道角運動量と呼ぶことができよう．

軌道角運動量は常に整数であるから，もしも系の全スピンが半整数（あるいは整数）であれば，全角運動量も半整数（あるいは整数）になることを指摘しよう．たとえば，もしも系が偶数個の同種粒子からできていれば，その全スピンは必ず整数であり，したがって全角運動量も整数である．

粒子の全角運動量演算子 $\boldsymbol{j}$（あるいは粒子系のそれ $\boldsymbol{J}$）は，軌道角運動量演算子やスピン演算子と同じ交換則を満たすが，それはこの規則があらゆる角運動量について一般に成り立つ共通の交換則であるためである．交換則から導かれる角運動量の行列要素に関する公式(27.13)は，行列要素を同じ角運動量の固有関数に関して定義すれば，あらゆる角運動量について同様に成り立つ．また任意のベクトル量の行列要素に関する公式(29.7)-(29.10)も（記号を適当に変えてやれば）そのまま成り立つ．

問題

スピン1/2の粒子が確定値 $s_z=1/2$ をもつ状態にある．z 軸から角度 θ だけ傾いた z' 軸へのスピンの投影がゆるされた値になる確率を求めよ．

解 スピン $\bar{\boldsymbol{s}}$ の平均ベクトルは明らかに z 軸を向いていて，大きさは1/2に等しい．これを z' 軸に投影すれば，z' 方向へのスピンの平均値は $\bar{s}_{z'}={}^1/_2\cos\theta$ である．他方 $w_\pm$ を $s_{z'}=\pm1/2$ となる確率とすれば，$\bar{s}_{z'}={}^1/_2(w_+-w_-)$ である．また $w_++w_-=1$ であることも考慮すれば，次式が得られる：

$$w_+=\cos^2(\theta/2),\qquad w_-=\sin^2(\theta/2).$$

§ 55. スピン演算子

以後この章では，波動関数の位置座標への依存性は問題としないことにする．たとえば，座標系の回転の際の関数 $\psi(x,y,z;\sigma)$ の振舞いを論ずるときは，粒子は座標の原点にあると仮定してよい．したがってその座標は回転に際して不変に保たれ，得られた結果はスピン変数 σ に依存する関数 ψ の振舞いを特徴づけるものになる．

変数 σ はその離散性ゆえに通常の変数（座標）と異なっている．離散的変数 σ の関数に作用する線形演算子のもっとも一般的な形は

$$(\hat{f}\psi)(\sigma)=\sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'}\psi(\sigma') \tag{55.1}$$

である．ここで $f_{\sigma\sigma'}$ は定数である．また $\hat{f}\psi$ を括弧で囲んだのは，あとに来るスピン引数 σ がもとの関数 ψ のものではなく，演算子 $\hat{f}$ を作用させたために生じた関数のものであることを示したかったからである．容易にわかるように，量 $f_{\sigma\sigma'}$ は通常の方法（11.5）によってえられる演算子 $\hat{f}$ の行列要素に一致する[1]．

定義（11.5）の中の座標についての積分は，ここでは離散的変数についての和に置き換えられて，行列要素の定義は次の形になる：

$$f_{\sigma_2\sigma_1}=\sum_{\sigma}\psi^*_{\sigma_2}(\sigma)[\hat{f}\psi_{\sigma_1}(\sigma)]. \tag{55.2}$$

ここで，$\psi_{\sigma_1}(\sigma)$ と $\psi_{\sigma_2}(\sigma)$ は，それぞれ演算子 $\hat{s}_z$ の固有値 $s_z=\sigma_1$ と $s_z=\sigma_2$ に対応する固有関数である．このような各関数は，粒子が s_z の確定値をとる状態に対応している．すなわち次のように，波動関数はその成分のうちの一つだけがゼロでない[2]：

$$\psi_{\sigma_1}(\sigma)=\delta_{\sigma\sigma_1},\qquad \psi_{\sigma_2}(\sigma)=\delta_{\sigma\sigma_2}. \tag{55.3}$$

（55.1）にしたがえば，

$$(\hat{f}\psi_{\sigma_1})(\sigma)=\sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'}\psi_{\sigma_1}(\sigma')=\sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'}\delta_{\sigma'\sigma_1}=f_{\sigma\sigma_1}$$

1）ここで，（55.1）の右辺の行列要素につける添字は，（11.11）の中の通常の順序と，逆の順序に書かれていることに注意しよう．

2）より正確には，$\psi_{\sigma_1}(\sigma)=\psi(x,y,z)\delta_{\sigma_1\sigma}$ と書かなければならない．

となる．この式を $f_{\sigma_2}(\sigma)$ とともに代入すると，(55.2) が自動的にみたされることは，上のような考え方の正しさを証明している．

このようなわけで，σ の関数に作用する演算子は $(2s+1)$ 次元の行列の形に表現することができる．たとえばスピンの演算子自身については，その波動関数への作用は，(55.1) により次の公式であらわされる：

$$(\hat{\mathbf{s}}\psi)(\sigma)=\sum_{\sigma'}\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}\psi(\sigma'). \tag{55.4}$$

上述（§54の終り）のことから行列 $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ は §27 で求めた行列 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ と一致する．ただ式の中で文字 L と M を s と σ で置きかえればよい．したがって，

$$\begin{aligned}(s_x)_{\sigma,\sigma-1}&=(s_x)_{\sigma-1,\sigma}=\frac{1}{2}\sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)},\\(s_y)_{\sigma,\sigma-1}&=-(s_y)_{\sigma-1,\sigma}=-\frac{i}{2}\sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)},\\(s_z)_{\sigma\sigma}&=\sigma\end{aligned} \tag{55.5}$$

となる．これをスピン演算子の定義としよう．

スピンが 1/2($s=1/2$, $\sigma=\pm1/2$) という重要な場合には，この行列は2行2列で次の形をしている：

$$\hat{\mathbf{s}}=\frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \tag{55.6}$$

ここで[1]，

$$(\hat{\sigma}_x)=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad(\hat{\sigma}_y)=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\qquad(\hat{\sigma}_z)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{55.7}$$

この行列 (55.7) は**パウリ行列**と呼ばれている．行列 $\hat{s}_z=\hat{\sigma}_z/2$ は対角であるが，これは，量 s_z 自身の固有関数によって定義される行列だから当然である[2]．

パウリ行列の特別な性質をいくつか見てみよう．行列 (55.7) の直接の掛け

---

1) 行列を (55.7) のように表示する場合に，行と列は，σ の値によって番号をつける．すなわち，行列要素の第1の添字は行番号，第2の添字は列番号に対応する．いまの場合は，これらの番号は $+1/2$ と $-1/2$ である．演算則 (55.4) から，演算子の作用は，行列の σ 番目の行と列状にならんだ波動関数

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi(1/2)\\\psi(-1/2)\end{pmatrix}$$

の成分との掛け算を意味することになる．

2) スピンの投影とパウリ行列を同じ文字で表わしても，混乱は起こらない：パウリ行列は文字の上に山印をつけている．

算から，次のような等式が得られる：

$$\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=1,\quad \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i\sigma_x,\quad \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x=i\sigma_y,\quad \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=i\hat{\sigma}_z. \tag{55.8}$$

これを通常の交換則 (54.1) と組み合わせると

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k+\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_i=2\delta_{ik} \tag{55.9}$$

が得られる．すなわちパウリ行列は反可換である．この関係を用いると次の有用な公式の成り立つことを容易に証明することができる：

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2=3,\qquad (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{a})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{b})=\boldsymbol{ab}+i\hat{\boldsymbol{\sigma}}[\boldsymbol{ab}], \tag{55.10}$$

ここで $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ は二つの任意のベクトルである[1]．

これらの関係があるので，行列 $\hat{\sigma}_i$ でつくられるすべてのスカラー多項式は，$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ に依存しない項と $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ についての1次の項になる．このことから，一般に，演算子 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ のあらゆるスカラー関数は1次関数に還元されることが導かれる（問題1参照）．最後に，パウリ行列とそれらの積の跡（対角要素の和）の値を見てみよう．それは

$$\mathrm{Sp}\,\sigma_i=0\,,\qquad \mathrm{Sp}\,\sigma_i\sigma_k=2\delta_{ik} \tag{55.11}$$

となる．

座標系を任意に回転させたときの波動関数の振舞いを含む，波動関数のスピンに関係した性質の詳しい研究は，この章の次の節で行なわれる．しかし，そのまえにこの節でも，これら関数の重要な性質——z 軸のまわりの回転に関する振舞い——について，ちょっと触れておこう．

z 軸のまわりに角度 $\delta\varphi$ の無限小回転を行なおう．このような回転の演算子は，角運動量演算子（いまの場合はスピン）を使って，$1+i\delta\varphi\hat{s}_z$ という形にあらわされる．それゆえ，回転の結果，関数 $\psi(\sigma)$ は $\psi(\sigma)+\delta\psi(\sigma)$ に移行する．ここで，

$$\delta\psi(\sigma)=i\delta\varphi\hat{s}_z\psi(\sigma)=i\sigma\psi(\sigma)\delta\varphi$$

である．この関係を $d\psi/d\varphi=i\sigma\psi(\sigma)$ と書き換えて積分すると，有限の角度 φ だけ回転したとき，関数 $\psi(\sigma)$ は関数

$$\psi(\sigma)'=\psi(\sigma)e^{i\sigma\varphi} \tag{55.12}$$

に移ることがわかる．とくに，角度 2π だけ回転すると，波動関数には，すべ

---

1) 等式 (55.8)-(55.10) の右辺の $\hat{\sigma}$ に依存しない項は，もちろん2行2列の単位行列にかかる定数と考えるべきである．

ての σ に対して共通で $(-1)^{2s}$ に等しい因子 $e^{2\pi i\sigma}$ がかかる（数 2σ はつねに $2s$ と等しい偶奇性をもっている）．したがって，z 軸のまわりに座標系を1回転させると，整数スピンをもつ粒子の波動関数は，もとの値にもどり，半整数のスピンをもつ粒子の波動関数は，その符号を変える．

問　　題

1.　パウリ行列について1次のスカラー $a+\boldsymbol{b}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ の任意関数を他の1次関数の形に変形せよ．

解　求める公式

$$f(a+\boldsymbol{b}\hat{\boldsymbol{\sigma}})=A+\boldsymbol{B}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

の中の係数を決定するために，$\boldsymbol{b}$ の方向に z 軸を選べば演算子 $a+\boldsymbol{b}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ の固有値は $a\pm b$ に等しく，またこれに対応する演算子 $f(a+\boldsymbol{b}\hat{\boldsymbol{\sigma}})$ の固有値は $f(a\pm b)$ であることに注意する．これから

$$A=\frac{1}{2}[f(a+b)+f(a-b)],\qquad \boldsymbol{B}=\frac{\boldsymbol{b}}{2b}[f(a+b)-f(a-b)]$$

が得られる．

2.　2粒子系のスピンの和 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ が確定値（0あるいは1）をとる状態において（大きさ1/2の）スピンのスカラー積 $\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2$ の値を求めよ．

解　2個の任意の角運動量の合成のときに成り立つ一般公式（31.3）によって，次のように求められる：

$$S=1 \text{ のとき } \boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2=1/4;\quad S=0 \text{ のとき } \boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2=-3/4.$$

3.　任意のスピン s の演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ の何次のベキまでが独立か？

解　$\hat{s}_z$ とすべての可能な固有値 s_z の差からつくられた演算子

$$(\hat{s}_z-s)(\hat{s}_z-s+1)\cdots(\hat{s}_z+s)$$

は任意の波動関数に作用させるとゼロを与える．それゆえそれ自身ゼロに等しい．これから $(\hat{s}_z)^{2s+1}$ は演算子 $\hat{s}_z$ のより低いベキであらわされることになる．したがって独立なものはその1次から $2s$ 次までのベキである．

§ 56.　スピノール

スピンがゼロの場合，波動関数は1個の成分しかもたない：$\psi(0)$．スピン演算子を作用させると，それはゼロになる：$\hat{\boldsymbol{s}}\psi=0$.

$\hat{\boldsymbol{s}}$ と無限小回転の演算子は結びついているので，これは，スピンがゼロの粒子の波動関数が座標系の回転に対して不変であること，すなわちスカラーであることを，示している．

スピン1/2の粒子の波動関数は2個の成分$\psi(1/2)$と$\psi(-1/2)$をもつ．あとで一般化するときに便利なように，それぞれの文字の右肩に添字の1と2をつけて，これらの成分を区別することにしよう；2成分の量

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi^1\\ \psi^2\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}\psi(1/2)\\ \psi(-1/2)\end{pmatrix} \tag{56.1}$$

は**スピノール**と呼ばれている．

座標系の任意の回転によってスピノールの成分は線形変換をうける：

$$\psi^{1\prime}=a\psi^1+b\psi^2,\qquad \psi^{2\prime}=c\psi^1+d\psi^2. \tag{56.2}$$

これは次の形に書くことができる：

$$\psi^{\lambda\prime}=(\hat{U}\psi)^\lambda,\qquad \hat{U}=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}, \tag{56.3}$$

ここで，$\hat{U}$は変換行列である[1]．この行列の要素は一般に複素数であり，また座標軸の回転角の関数である．これらは，スピノールや粒子の波動関数に課される物理的要請から直接導かれる関係によって，互いに結ばれている．

つぎの双1次形式を考えよう：

$$\psi^1\varphi^2-\psi^2\varphi^1, \quad \psi^1\varphi^2-\psi^2\varphi^1 \tag{56.4}$$

ここでψとφは二つのスピノールである．かんたんな計算から

$$\psi^{1\prime}\varphi^{2\prime}-\psi^{2\prime}\varphi^{1\prime}=(ad-bc)(\psi^1\varphi^2-\psi^2\varphi^1)$$

となる．すなわち(56.4)であらわされる量は座標系の回転によって自分自身へ変換される．ところがもしも自分自身へ変換される関数が一つしかなければ，それはゼロ・スピンに対応するとみなすことができる．したがってそれはスカラー，すなわち一般に座標系の回転に対して不変でなければならない．これから等式

$$ad-bc=1 \tag{56.5}$$

が得られる．すなわち，この行列の行列式は1に等しい[2]．

---

1)　$\hat{U}\psi$と書くと，行列$\hat{U}$の行と列状のψの積を意味している．

2)　二つの量のこのような変換は，**バイナリ変換**と呼ばれている．(本教程では，スピノールを特徴づける変換のこの性質を，変換のもう一つの性質であるユニタリ(これには一あるいは単位の意がある)と対置して，バイナリ(これには二あるいは双の意がある)と呼んでいる．しかしバイナリ変換という用語は，本教程以外ではあまり用いられていない．わが国ではむしろ，変換行列の行列式が1に等しいことを直接あらわす数学用語をそのまま使って，ユニモジュラー(単模)変換と呼ぶことが多い．したがって，バイナリ変換＝2次元ユニモジュラー(単模)変換ということになる．訳者)．

空間のある点に粒子が見いだされる確率を定義する表式

$$\psi^1\psi^{1*}+\psi^2\psi^{2*} \tag{56.6}$$

がスカラーであるという要請から，さらに関係が生まれる．変換される量の絶対値の自乗の和を不変にする変換は，ユニタリ変換である．すなわち，それは $\hat{U}^+=\hat{U}^{-1}$ でなければならない（§12参照）．(56.5) の条件があると，逆行列は

$$\hat{U}^{-1}=\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

である．エルミート共役行列

$$\hat{U}^+=\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}$$

をこれと等置すれば，次の関係がえられる：

$$a=d^*, \qquad b=-c^*. \tag{56.7}$$

関係 (56.5) と (56.7) があるために，4個の複素量 a, b, c, d は，実際には，全部で3個の独立な実パラメーターを含んでいる．これは3次元の座標系の回転を定義する3個の角度に対応している．

スカラー (56.4) と (56.6) の表式を比較すると，量 ψ^{1*} と ψ^{2*} は ψ^2 と $-\psi^1$ のように変換しなければならないことがわかる．これが実際そうなっていることは，関係 (56.5) と (56.7) があるので，容易に証明することができる[1)]．

スピノール代数にはテンソル代数と類似の形式を与えることができる．これは，スピノールの**反変成分** ψ^1, ψ^2（上つき添字）の他に，定義

$$\psi_1=\psi^2, \qquad \psi_2=-\psi^1 \tag{56.8}$$

によって**共変成分**（下つき添字）を導入して行なう．

そうすると，二つのスピノールの不変結合 (56.4) は次のようなスカラー積の形に書くことができる：

$$\psi^\lambda\varphi_\lambda=\psi^1\varphi_1+\psi^2\varphi_2=\psi^1\varphi^2-\psi^2\varphi^1. \tag{56.9}$$

ここおよび以下ではテンソル代数で行なわれるのと同様に，二度くり返される（見かけの）添字については和をとるものとする．スピノール代数で考慮すべき

1) この性質は，時間反転に関する対称性と密接に結びついている．時間反転は，波動関数をそれの複素共役で置き換えることに対応している（§18参照）．しかし，時間を反転すると，角運動量の投影も符号を変える．それゆえ，成分 $\psi^1\equiv\psi(1/2)$ と $\psi^2\equiv\psi(-1/2)$ に複素共役な関数は，その性質が，それぞれスピン投影 $-1/2$ と $1/2$ に対応する成分と同等でなければならない．

次の規則を覚えておこう．それは $\psi^\lambda\varphi_\lambda=\psi^1\varphi_1+\psi^2\varphi_2=-\psi_2\varphi^2-\psi_1\varphi^1$，すなわち

$$\psi^\lambda\varphi_\lambda=-\psi_\lambda\varphi^\lambda \tag{56.10}$$

である．これから明らかなように，任意のスピノールのそれ自身とのスカラー積はゼロに等しい：

$$\psi^\lambda\psi_\lambda=0. \tag{56.11}$$

以上述べたことにしたがうと，量 ψ_1, ψ_2 は，ψ^{1*}, ψ^{2*} と同じように変換される．すなわち

$$\psi'_\lambda=(\hat{U}^*\psi)_\lambda \tag{56.12}$$

である．積 $\hat{U}^*\psi$ は，転置行列 $\tilde{\hat{U}}^*$ を用いて $\psi\tilde{\hat{U}}^*$ という形に書くこともできる．行列 $\hat{U}$ のユニタリ性によって $\tilde{\hat{U}}^*=\hat{U}^{-1}$ であり，したがって $\psi'_\lambda=(\psi\hat{U}^{-1})_\lambda$，あるいは

$$\psi_\lambda=(\psi'\hat{U})_\lambda \tag{56.13}$$

となる[1]．

通常のテンソル代数でベクトルからテンソルへ向かうのと同じように，**高階のスピノール**という概念を導入することができる．すなわち，その成分が二つのスピノール（1階のスピノール）成分の積 $\psi^\lambda\varphi^\mu$ と同じように変換する4成分の量 $\psi^{\lambda\mu}$ を2階のスピノールと呼ぶ．反変成分 $\psi^{\lambda\mu}$ とならんで，それぞれ積 $\psi_\lambda\varphi_\mu$ および $\psi_\lambda\varphi^\mu$ と同じように変換する共変成分 $\psi_{\lambda\mu}$ と混合成分 $\psi_\lambda{}^\mu$ を考えることができる．任意階のスピノールも同じように定義できる．

テンソルの反変成分から共変成分への移行とその逆は次の形に表わすことができる：

$$\psi_\lambda=g_{\lambda\mu}\psi^\mu, \qquad \psi^\lambda=g^{\mu\lambda}\psi_\mu, \tag{56.14}$$

ここで

$$(g_{\lambda\mu})=(g^{\lambda\mu})=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{56.15}$$

は2次元ベクトル空間の**計量スピノール**である．同様にして例えば，

$$\psi_\lambda{}^\mu=g_{\lambda\nu}\psi^{\nu\mu}, \qquad \psi_{\lambda\mu}=g_{\lambda\nu}g_{\mu\rho}\psi^{\nu\rho},$$

すなわち $\psi_{12}=-\psi_1{}^1=-\psi^{21}$，$\psi_{11}=\psi_1{}^2=\psi^{22}$ 等である．

---

1) $\psi\hat{U}$（$\hat{U}$ の左に ψ）という形の書き方は，行状に並んだ成分 (ψ_1, ψ_2) と行列 $\hat{U}$ の列との積を意味する．

$g_{\lambda\mu}$ という量はそれ自身2階の反対称単位スピノールである．容易に確められるように，座標変換に際してその成分は不変に保たれ，さらに

$$g_{\lambda\nu}g^{\mu\nu}=\delta^{\mu}_{\lambda} \tag{56.16}$$

となる．ここで，$\delta^1_1=\delta^2_2=1$，$\delta^1_2=\delta^2_1=0$ である．

通常のテンソル代数と同様に，スピノール代数にも二つの基本的演算——積および添字の対に関する縮約——が存在する．2個のスピノールの積はより高階のスピノールを生む．たとえば2階と3階の2個のスピノール $\psi_{\lambda\mu}$ と $\phi^{\nu\rho\sigma}$ から5階のスピノール $\psi_{\lambda\mu}\phi^{\nu\rho\sigma}$ をつくることができる．添字の対に関する縮約（すなわち，同じ値にそろえた共変添字1個と反変添字1個に関する成分の和）はスピノールの階数を2だけ低下させる．たとえばスピノール $\psi_{\lambda\mu}{}^{\nu\rho\sigma}$ の添字 μ と ν に関する縮約は3階のスピノール $\psi_{\lambda\mu}{}^{\mu\rho\sigma}$ を与える．またスピノール $\psi_{\lambda}{}^{\mu}$ の縮約はスカラー $\psi_{\lambda}{}^{\lambda}$ を与える．このとき公式 (56.10) の表式に似た規則がある．すなわち，縮約を行なうべき添字の位置（上つきと下つき）を交換すれば，符号が変る（すなわち $\psi_{\lambda}{}^{\lambda}=-\psi^{\lambda}{}_{\lambda}$ となる）．これから，とくにスピノールがある二つの添字について対称であれば，この添字に関する縮約の結果はゼロになることが導かれる．したがって2階の対称スピノール $\psi_{\lambda\mu}$ では，$\psi_{\lambda}{}^{\lambda}=0$ となる．

すべての添字について対称なスピノールを n 階の**対称スピノール**と呼ぶ．非対称スピノールからは対称化の方法——あらゆる可能な添字の置換によって得られる成分の和をとる——によって対称スピノールを組み立てることができる．上に述べたことによって，対称スピノールからは階数の低いスピノールを（縮約によって）つくることはできない．

（すべての添字について）反対称なスピノールといえば，それは2階のスピノールだけである．実際，各添字は二つの値をとるだけなので，3個あるいはそれ以上の添字があると，少なくともそのうちの2個は同じ値をとる．それゆえスピノールの成分は恒等的にゼロとなる．すべての2階の反対称スピノールはスカラーに単位スピノール $g_{\lambda\mu}$ を掛けたものである．ここでいま述べたことから出てくる次の関係に注目しよう：

$$g_{\lambda\mu}\psi_{\nu}+g_{\mu\nu}\psi_{\lambda}+g_{\nu\lambda}\psi_{\mu}=0\,. \tag{56.17}$$

ここで ψ_{λ} は任意のスピノールである．この規則は，この等式の左辺にある表式が（容易に示されるように）3階の反対称スピノールであることから簡単に

結論される．スピノール$\psi_{\lambda\mu}$の自分自身との積を一対の添字に関して縮約してつくられるスピノールは他の一対の添字については反対称となる．実際，

$$\psi_{\lambda\nu}\psi_{\mu}{}^{\nu}=-\psi_{\lambda}{}^{\nu}\psi_{\mu\nu}.$$

となる．それゆえ，上に述べたことから，このスピノールはスカラーにスピノール$g_{\lambda\mu}$を掛けたものになるはずである．第2の添字の対に関する縮約が正しい結果を与えるように，このスカラー因子を決めると

$$\psi_{\lambda\nu}\psi_{\mu}{}^{\nu}=-\frac{1}{2}\psi_{\rho\sigma}\psi^{\rho\sigma}g_{\lambda\mu} \tag{56.18}$$

が得られる．

$\psi_{\lambda\mu\ldots}$に複素共役なスピノール$\psi^{*}_{\lambda\mu\ldots}$は反変スピノール$\varphi^{\lambda\mu\cdots}$と同じように変換する．またその逆も成り立つ．したがって，任意のスピノールの成分の絶対値の自乗の和は不変式である．

§ 57. 任意のスピンをもつ粒子の波動関数

前節で任意の階数のスピノールの代数学の諸定理を展開したので，次にわれわれに直接関係のある問題——任意のスピンをもつ粒子の波動関数の性質の研究——にとりかかることができる．

この問題に近づくにはスピン1/2のn個の粒子の集団を考えるのがよい．この系の全スピンのz成分の可能な最大値は$n/2$である．これは各粒子で$s_z=1/2$の場合に得られる（すべてのスピンがz軸に平行に一方向を向いている）．この場合には，明らかに系の全スピンSも$n/2$に等しい．

この場合，粒子系の波動関数の成分$\psi(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$はただ1個——$\psi(1/2, 1/2, \cdots, 1/2)$——を除いてすべてゼロに等しい．もしも波動関数をそれぞれ各粒子に属するn個のスピノールの積$\psi^{\lambda}\varphi^{\mu}\cdots$の形に書けば，その各スピノールの成分のうちでゼロでないのは$\lambda, \mu, \cdots=1$の成分のみである．したがってゼロでない積は$\psi^{1}\varphi^{1}\cdots$のみである．しかしこれらの積をぜんぶまとめた一組はそれ自身すべての添字について対称なあるn階のスピノールになっている．もしも座標系の変換を行なえば（したがってスピンがz軸でない方向を向くと），一般的な形のn階のスピノールが得られる．しかし，それは依然として対称のままである．

波動関数のスピンに関連した性質は本質的には座標系の回転に関する波動関数の性質であるから，その性質はスピン s をもつ粒子のものも，また全スピンが s に等しくなるように向いたスピン $1/2$ の $n=2s$ 個の粒子からなる系のものも同様であろう．このことからスピン s をもつ粒子の波動関数は $n=2s$ 階の対称スピノールであると結論してよい．

$2s$ 階の対称スピノールの独立成分の数が当然ながら，やはり $2s+1$ であることを見るのは容易である．実際，その添字に $2s$ 個の 1 とゼロ個の 2 のある成分，$2s-1$ 個の 1 と 1 個の 2 のある成分，…と進んでゼロ個の 1 と $2s$ 個の 2 のある成分まで，これだけが異なる成分である．

数学的に見れば，座標系の回転に伴う物理量の変換の可能な型は対称スピノールに照して分類される．もしも相互に 1 次変換する $2s+1$ 個の異なる量があれば（しかもその数がそれらのどのような 1 次結合を選んでも減少しなければ），その変換則は $2s$ 階の対称スピノールの成分の変換則と同等であるということができる．座標系の回転によって相互に 1 次変換される任意の数の関数の組は，すべて（適当な 1 次変換によって）1 個あるいは数個の対称スピノールへ還元される[1]．

たとえば n 階の任意のスピノール $\psi_{\lambda\mu\nu\ldots}$ は $n, n-2, n-4, \cdots$ 階の対称スピノールに還元することができる．実際にはこれは次のようにして行なわれる．スピノール $\psi_{\lambda\mu\nu\ldots}$ をすべての添字について対称化して，同じ n 階の対称スピノールをつくる．次にもとのスピノール $\psi_{\lambda\mu\nu\ldots}$ を添字のいろいろな対に関して縮約し，$\psi^{\lambda}{}_{\lambda\nu\ldots}$ という形の $(n-2)$ 階のスピノールをつくり，次にそれを対称化して $(n-2)$ 階の対称スピノールをつくる．また $\psi_{\lambda\mu\ldots}$ を 2 対の添字に関して縮約して得られるスピノールを対称化すれば $(n-4)$ 階の対称スピノールが得られる…等々である．

$2s$ 階の対称スピノールの成分と $2s+1$ 個の関数 $\psi(\sigma)$（ここで $\sigma=s, s-1, \cdots, -s$）の間の関係を確立することが残された問題である．添字の中に 1 が $s+\sigma$ 回くり返され，2 が $(s-\sigma)$ 回見いだされる成分

$$\psi^{\overbrace{\scriptstyle 11\ldots1}^{}_{s+\sigma}\overbrace{\scriptstyle 22\ldots2}^{s-\sigma}}$$

1）いいかえれば，対称スピノールはいわゆる回転群の既約表現になっている（§98 参照）．

はスピンの z 軸への投影が σ に等しい場合に対応している．実際，スピン s をもつ1個の粒子のかわりに再びスピン1/2をもつ $n=2s$ 個の粒子の系を考えると，上記の成分は次の積に対応するであろう：

$$\overbrace{\psi^1\varphi^1\cdots}^{s+\sigma}\overbrace{\chi^2\rho^2\cdots}^{s-\sigma}.$$

このような積は $(s+\sigma)$ 個の粒子が $+1/2$ に等しいスピン投影を，また $(s-\sigma)$ 個が $-1/2$ に等しい投影をもって，その和が $(s+\sigma)/2-(s-\sigma)/2=\sigma$ に等しい状態に対応している．最後に上記のスピノール成分と $\psi(\sigma)$ との間の比例係数は，等式

$$\sum_{\sigma=-s}^{+s}|\psi(\sigma)|^2=\sum_{\lambda,\mu,\cdots=1}^{2}|\psi^{\lambda\mu\cdots}|^2 \tag{57.1}$$

が成り立つように選ぶ（この和は空間の与えられた点に粒子が見いだされる確率を与えるので，当然ながらスカラーである）．この式の右辺の和の中には，添字1を $(s+\sigma)$ 個もつ成分は

$$\frac{(2s)!}{(s+\sigma)!\,(s-\sigma)!}$$

回見いだされる．それゆえ明らかに，関数 $\psi(\sigma)$ とスピノールの成分との対応は次の公式によって与えられる：

$$\psi(\sigma)=\sqrt{\frac{(2s)!}{(s+\sigma)!\,(s-\sigma)!}}\,\psi^{\overbrace{\scriptstyle 22\cdots2}^{s-\sigma}}_{\underbrace{\scriptstyle 11\cdots1}_{s+\sigma}}. \tag{57.2}$$

関係式（57.2）によって条件（57.1）だけでなく，容易に確められるように，もっと一般的な次の条件もその成立が保証されている：

$$\psi^{\lambda\mu\cdots}\varphi_{\lambda\mu\cdots}=\sum_{\sigma}(-1)^{s-\sigma}\psi(\sigma)\varphi(-\sigma). \tag{57.3}$$

ここで $\psi^{\lambda\mu\cdots}$ と $\varphi_{\lambda\mu\cdots}$ は同じ階数の二つの異なるスピノールであり，$\psi(\sigma)$ と $\varphi(\sigma)$ はこれらのスピノールから公式（57.2）によってつくられる関数である（因子 $(-1)^{s-\sigma}$ は，スピノールの成分のすべての添字を肩に上げると，添字の中の2の数と同じ回数だけ符号が変わることと関連している）．

波動関数 $\psi(\sigma)$ にスピン演算子を作用させた結果は公式（55.5）で定義されている．$2s$ 階のスピノールの形に書いた波動関数にこの演算子がどのように作用するかを明らかにすることは困難ではない．スピン1/2の場合には関数 $\psi(+1/2), \psi(-1/2)$ はスピノールの ψ^1, ψ^2 成分と一致する．（55.6）と（55.7）

によれば，これにスピン演算子を作用させた結果は次のようになる：

$$\begin{aligned} &(\hat{s}_x\psi)^1=\frac{1}{2}\psi^2, \qquad (\hat{s}_y\psi)^1=-\frac{i}{2}\psi^2, \qquad (\hat{s}_z\psi)^1=\frac{1}{2}\psi^1, \\ &(\hat{s}_x\psi)^2=\frac{1}{2}\psi^1, \qquad (\hat{s}_y\psi)^2=\frac{i}{2}\psi^1, \qquad (\hat{s}_z\psi)^2=-\frac{1}{2}\psi^2. \end{aligned} \tag{57.4}$$

一般の，任意のスピンの場合へ移るために，ふたたびスピン 1/2 の $2s$ 個の粒子からなる系を考え，その波動関数を $2s$ 個のスピノールの積の形に書こう．粒子系のスピン演算子は各粒子のスピン演算子の和である．そしてこの各粒子のスピン演算子は対応するスピノールのみに作用し，その演算結果は公式 (57.4) で定められる．そこで逆に任意の対称スピノール，すなわちスピン s の粒子の波動関数へ戻ると，次の公式が得られる：

$$\begin{aligned} &(\hat{s}_x\psi)^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma}}=\frac{s+\sigma}{2}\psi^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma-1}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma+1}}+\frac{s-\sigma}{2}\psi^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma+1}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma-1}}, \\ &(\hat{s}_y\psi)^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma}}=-i\frac{s+\sigma}{2}\psi^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma-1}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma+1}}+i\frac{s-\sigma}{2}\psi^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma+1}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma-1}}, \\ &(\hat{s}_z\psi)^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma}}=\sigma\psi^{\overbrace{11\cdots}^{s+\sigma}\overbrace{22\cdots}^{s-\sigma}}. \end{aligned} \tag{57.5}$$

これまでスピノールを素粒子の固有角運動量の波動関数として議論してきた．しかし形式的に見れば，個別粒子のスピンと任意の体系を内部構造に立ち入らずに全体として眺めたときの全角運動量との間には何の相違もない．それゆえ明らかに，全角運動量 j をもつ任意の粒子（あるいは粒子系）の波動関数 ψ_{jm} の空間回転に関する振舞いは，その角運動量の本性（軌道かスピンか）には無関係であって，スピノールの変換性がひとしく当てはまる．したがって座標系を回転した場合の固有関数 ψ_{jm} の変換則と $2j$ 階の対称スピノールの成分の変換則との間には，一定の対応関係が存在するはずである．

しかしこの対応関係を明らかにする場合，（j の値を与えたときの）角運動量投影 m への波動関数の依存性の二つの側面をはっきり区別する必要がある．すなわち波動関数をいろいろな m の値に対する確率振幅として論ずる場合と，与えられた m の値に対する固有関数として論ずる場合である．

この二つの側面は，値 $s_z=\sigma_0$ に対応する演算子 $\hat{s}_z$ の固有関数 $\delta_{\sigma\sigma_0}$ を考察した§55 のはじめにもすでに問題にしたことがある．両者の数学的相違がとくに明

瞭にわかるのは，スピン1/2の粒子の例である．この場合にはスピン関数は変数σに関しては1階の反変スピノールである．すなわちそれはスピノール記号にしたがって$\delta^{\sigma}_{\sigma_0}$と書くべきものである．それゆえ$\sigma_0$に関してはそれは共変スピノールである．この事情は明らかに一般的な性格をもっている．すなわち，固有関数ψ_{jm}には，(57.2)と類似の次の公式によって$2j$階の共変対称スピノールの成分を対応させることができる[1]：

$$\psi_{jm}=\sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!\,(j-m)!}}\psi_{\underbrace{11\cdots}_{j+m}\underbrace{22\cdots}_{j-m}}. \tag{57.6}$$

整数の角運動量jに対する固有関数は球関数Y_{jm}である．とくに$j=1$の場合が重要である．その3個の球関数Y_{1m}は

$$Y_{10}=i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}n_z,$$

$$Y_{1,\pm1}=\mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{\pm i\varphi}=\mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(n_x\pm in_y)$$

である（$\boldsymbol{n}$は動径ベクトル方向の単位ベクトル）．明らかに，この三つの関数の変換性は，それぞれ次の公式によってあらわされるような，あるベクトル$\boldsymbol{a}$の成分の変換性と同等である：

$$\psi_{10}=ia_z,\qquad \psi_{11}=-\frac{i}{\sqrt{2}}(a_x+ia_y),\qquad \psi_{1,-1}=\frac{i}{\sqrt{2}}(a_x-ia_y). \tag{57.7}$$

この式と公式(57.6)の比較からわかるように，2階の対称スピノールの成分は次の公式によって，あるベクトルの成分と対応させることができる：

$$\psi_{12}=\frac{i}{\sqrt{2}}a_z,\quad \psi_{11}=-\frac{i}{\sqrt{2}}(a_x+ia_y),\quad \psi_{22}=\frac{i}{\sqrt{2}}(a_x-ia_y), \tag{57.8}$$

$$\psi^{12}=-\frac{i}{\sqrt{2}}a_z,\quad \psi^{11}=\frac{i}{\sqrt{2}}(a_x-ia_y),\quad \psi^{22}=-\frac{i}{\sqrt{2}}(a_x+ia_y). \tag{57.9}$$

また逆にとけば

---

1) この結論にはいくつかの別の道からも達することができる．もしも角運動量jの状態にある粒子の波動関数ψを固有関数ψ_{jm}で展開して$\psi=\sum_m a_m\psi_{jm}$とすれば，係数a_mはいろいろな値のmに対する確率振幅をあらわしている．この意味でこれらのa_mはスピン波動関数の《成分》$\psi(m)$に対応しており，このことからその変換則は決まってしまう．他方空間の与えられた点におけるψの値は座標系の選び方には依存しないはずである．すなわち和$\sum a_m\psi_{jm}$はスカラーでなければならない．そこでスカラー(57.3)と比較すると，a_mは$(-1)^{j-m}\psi_{j,-m}$のように変換すべきことがわかる．

$$a_z=i\sqrt{2}\psi^{12},\quad a_x=\frac{i}{\sqrt{2}}(\psi^{22}-\psi^{11}),\quad a_y=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^{11}+\psi^{22}) \tag{57.10}$$

である．このように定義すると，等式

$$\psi_{\lambda\mu}\varphi^{\lambda\mu}=\boldsymbol{ab} \tag{57.11}$$

が成り立つことを容易に証明することができる．ここで $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ は対称スピノール $\psi^{\lambda\mu}$ と $\varphi^{\lambda\mu}$ に対応するベクトルである．またスピノールとベクトル：

$$\psi^{\lambda}_{\nu}\varphi^{\mu\nu}+\psi^{\mu}_{\nu}\varphi^{\lambda\nu}\quad \text{と}\quad \sqrt{2}[\boldsymbol{ab}] \tag{57.12}$$

のあいだの対応関係を確かめるのも容易である[1]．

公式 (57.10) は，パウリ行列を使って簡潔な形に書くことができる，

$$\boldsymbol{a}=\frac{i}{\sqrt{2}}\boldsymbol{\sigma}^{\lambda}{}_{\mu}\psi^{\mu}_{\lambda},\qquad \psi^{\mu}_{\lambda}=-\frac{i}{\sqrt{2}}\boldsymbol{a}\boldsymbol{\sigma}^{\mu}{}_{\lambda} \tag{57.13}$$

($\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ につける行列添字は，ψ^{μ}_{λ} につけるスピノール添字の位置にあわせて，上つきと下つきに書く)．この公式の由来は，2階のスピノール ψ^{μ}_{λ} が，ある1階のスピノール ψ^{μ} と，それの複素共役 $\psi^{\lambda *}$ との積になる特別な場合を考えれば，容易に理解できよう．たしかにこの場合には，量

$$\frac{1}{2}\psi^{\lambda *}\boldsymbol{\sigma}^{\lambda}{}_{\mu}\psi^{\mu}$$

は（波動関数 ψ^{μ} をもった粒子の）スピンの平均値である．したがって，そのベクトル性は明白である．

(57.8) あるいは (57.9) の対応関係は，偶数 $2j$ 階（j は整数）のすべての対称スピノールには，任意の1対の添字について縮約するとゼロになるような半分の階数（j）の対称テンソル（このようなテンソルを**既約テンソル**と呼ぶ）を対応させることができるという一般規則の特別な場合にあたっている．このことは，簡単な計算によって容易に確かめられるように，このようなスピノールとテンソルの独立成分の数が同じ（$2j+1$ に等しい）ことから導かれる[2]．ある階数のスピノールをいくつかの2階のスピノールの積と見，またテンソルをベクトルの積と見れば，公式 (57.8)-(57.10) を用いてスピノール成分とテンソル成分の間の対応関係を求めることができる．

---

1) 対称スピノールの混合成分は $\psi^{\lambda}{}_{\mu}$ と $\psi_{\mu}{}^{\lambda}$ を区別せずに ψ^{λ}_{μ} という形に書くことができる．

2) 言いかえれば，j 階の既約テンソルの $2j+1$ 個の成分（j は整数）は，$2j+1$ 個の球関数 Y_{jm} の組と同様に，また $2j$ 階の対称スピノールの $2j+1$ 個の成分と同様に，回転群の同じ既約表現に属している．

問　　題

1. 大きさ1/2のスピン演算子の定義式（57.4）を，ベクトル$\hat{\boldsymbol{s}}$のスピノール成分を用いて書きかえよ．

解 ベクトル$\hat{\boldsymbol{s}}$とスピノール$\hat{s}^{\lambda\mu}$の関係を定めている公式（57.9）を考慮すると，定義（57.4）は次の形に書くことができる：

$$\hat{s}^{\lambda\mu}\psi^{\nu}=\frac{i}{2\sqrt{2}}(\psi^{\lambda}g^{\mu\nu}+\psi^{\mu}g^{\lambda\nu}).$$

2. スピン1をもつ粒子のベクトル波動関数に働くスピン演算子の作用を定義する公式を書け．

解 ベクトル関数$\boldsymbol{\psi}$の成分とスピノールの成分$\psi^{\lambda\mu}$の関係は公式（57.9）によって与えられる．これと式（57.5）から次式が得られる：

$$\hat{s}_z\psi_+=-\psi_+,\quad \hat{s}_z\psi_-=\psi_-,\quad \hat{s}_z\psi_z=0,$$

（ここで，$\psi_\pm=\psi_x\pm i\psi_y$）あるいは

$$\hat{s}_z\psi_x=-i\psi_y,\quad \hat{s}_z\psi_y=i\psi_x,\quad \hat{s}_z\psi_z=0.$$

残りの式はこれから添字x, y, zを循環的に置きかえることによって得られる．これらは一括して次の形に書くことができる：

$$\hat{s}_i\psi_k=-ie_{ikl}\psi_l.$$

複素ベクトル$\boldsymbol{\psi}$は$\boldsymbol{\psi}=e^{i\alpha}(\boldsymbol{u}+i\boldsymbol{v})$という形にあらわすことができる．ここで$\boldsymbol{u}$と$\boldsymbol{v}$は実ベクトルであって，共通の位相$\alpha$を適当に選べば，互いに垂直になるように決めることができる．この二つのベクトル$\boldsymbol{u}$と$\boldsymbol{v}$は次のような性質をもった平面を定義する．すなわち，それに垂直な方向へのスピンの投影が±1という値しかとり得ないような平面である．

§ 58. 有限回転の演算子

スピノールの変換の問題に進もう．そして，この変換の係数が，座標軸の回転角によって，実際にどのように表わされるかを示そう．

角運動量（いまはスピン）演算子の定義によれば，表式$1+i\delta\varphi\cdot\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{s}}$は単位ベクトル$\boldsymbol{n}$の方向の軸のまわりに角度$\delta\varphi$だけ回転させる演算子である．スピン1/2をもつ粒子の波動関数，すなわち，1階のスピノールに作用させる場合には，この演算子の中で$\hat{\boldsymbol{s}}=\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$としなければならない．したがって，同じ軸のまわりに有限の角度φだけ回転させる演算子は，次の式で与えられる：

$$\hat{U}_{\boldsymbol{n}}=\exp\,(i\varphi\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2) \tag{58.1}$$

（(15.13) と比較せよ）．パウリ行列のあらゆる関数と同様に，この表式も，この行列について線形の表式に変形される（§55 の問題 1 参照）：

$$\hat{U}_n=\cos\frac{\varphi}{2}+i\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\sin\frac{\varphi}{2}. \tag{58.2}$$

例えば，z 軸のまわりの回転ならば，

$$\hat{U}_z(\varphi)=\cos\frac{\varphi}{2}+i\hat{\sigma}_z\sin\frac{\varphi}{2}=\begin{pmatrix}e^{i\varphi/2} & 0\\ 0 & e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix} \tag{58.3}$$

がえられる．このような回転があると，スピノールの成分は，規則

$$\psi^{1'}=\psi^1e^{i\varphi/2},\qquad \psi^{2'}=\psi^2e^{-i\varphi/2}$$

にしたがって変換することを，これは意味している．とくに，角度 2π だけ回転すると，スピノールの成分は符号を変える．任意の奇数階のスピノールも，したがって，同じ性質をもっている（§55 の終りの段と比較せよ）．

同じようにして，x 軸あるいは y 軸のまわりの角度 φ の回転を表わす変換行列を求めると

$$\hat{U}_x(\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\varphi}{2} & i\sin\frac{\varphi}{2}\\ i\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2}\end{pmatrix},\quad \hat{U}_y(\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\varphi}{2} & \sin\frac{\varphi}{2}\\ -\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2}\end{pmatrix} \tag{58.4}$$

となる．y 軸のまわりの回転角が π という特別な場合には，

$$\psi^{1'}=\psi^2,\qquad \psi^{2'}=-\psi^1,$$

すなわち

$$\psi^{1'}=\psi_1,\qquad \psi^{2'}=\psi_2 \tag{58.5}$$

となる．

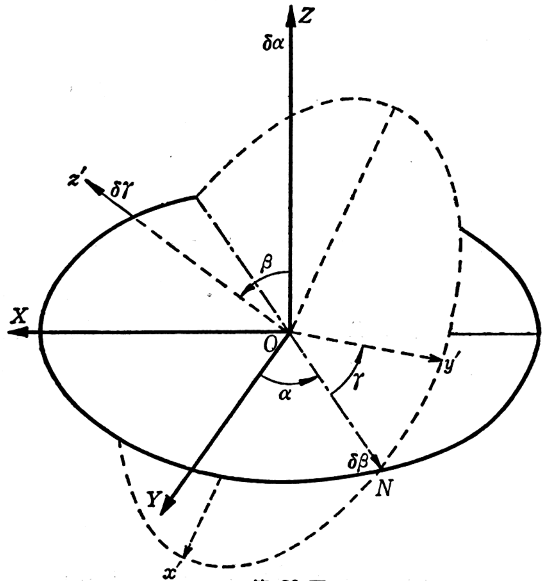
ここまでくると，座標軸を任意に回転させる場合の変換行列を，この回転を定義するオイラー角の関数として書くことは容易である．

オイラー角 α,β,γ によって定義される軸の回転は，次の 3 つの動作で行なわれる：1）z 軸のまわりに角度 α $(0\leq\alpha\leq2\pi)$ の回転，2）新しい向きの y 軸（第 20 図の ON，交線と呼ばれている）のまわりの角度 β $(0\leq\beta\leq\pi)$ の回転，3）z 軸が最後に向いた z' 軸のまわりの角度 γ $(0\leq\gamma\leq2\pi)$ の回転[1]．

1）いつものように，xyz 系と $x'y'z'$ 系は右手系である．そして，角度を測るときの正方向は，回転軸の正の方向にねじ込まれる右ねじの回る方向である．

ここに与えたオイラー角の定義は（量子力学で採用されているもので），第 2 の回転が，y 軸のまわりに行なわれて，x 軸のまわりでない点が，第 I 巻『力学』の §35 の定義と異なっている．角度 α,β,γ は，第 I 巻『力学』の角度 φ,θ,ψ（球角 φ,θ と混同しないように！）と次の関係で結ばれている：

$$\varphi=\alpha+\frac{\pi}{2},\qquad \theta=\beta,\qquad \psi=\gamma-\frac{\pi}{2}.$$



第 20 図

明らかに，角度 α, β は，xyz 軸を基準とする新しい z' 軸の球角 φ, θ に一致している：$\alpha=\varphi, \beta=\theta$.

軸の回転がこのように行なわれるので，全変換行列は三つの行列 (58.3)-(58.4) の積に等しくなる：

$$\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)=\hat{U}_z(\gamma)\hat{U}_y(\beta)\hat{U}_z(\alpha).$$

行列の直接の掛け算から，結局次の式がえられる：

$$\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2}\cdot e^{i(\alpha+\gamma)/2} & \sin\frac{\beta}{2}\cdot e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ -\sin\frac{\beta}{2}\cdot e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}\cdot e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\end{pmatrix}. \qquad (58.6)$$

高階のスピノールは，定義にしたがって，1階のスピノールの成分の積と同じように変換する．しかし物理への応用上は，スピノール自身の変換則よりもむしろ，対応する波動関数 ψ_{jm} の変換則の方が興味がある．

関数 ψ_{jm} $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ は，角運動量が確定値 j をもつ状態を xyz 座標系の中で記述し，関数 $\psi_{jm'}$ の方は，同じ状態を $x'y'z'$ 軸に関連させて記述

するものとしよう．第一の場合には，m は j_z の値であり，第二の場合には，$m'=j_{z'}$ である．これら２種の関数は，互いに線形関係で結ばれていて，次のように書かれる：

$$\psi_{jm}=\sum_{m'} D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)\psi_{jm'}. \qquad (58.7)$$

係数 $D^{(j)}_{m'm}$ は，（添字 $m'm$ について）次数が $2j+1$ の行列，すなわち，**有限回転の行列** $\hat{D}^{(j)}$ を構成している．この行列の要素は，座標系 xyz に対する座標系 $x'y'z'$ の回転角 α,β,γ の関数である．

関数 ψ_{jm} のスピノール表現を用いれば，有限回転の行列を組み立てることができる．

$j=1/2$ の場合には，二つの関数 $\psi_{1/2\,m}$ $(m=\pm1/2)$ は，１階の共変スピノールを成している．これの（$x'y'z'$ 系から xyz 系への）変換は，(56.13) に従い，(58.6) の行列 $\hat{U}$ によって行なわれる．したがって $\hat{D}^{(1/2)}=\hat{U}$ である[1]．この行列要素を次の形に書こう：

$$D^{(1/2)}_{m'm}=e^{im'\gamma}d^{(1/2)}_{m'm}(\beta)e^{im\alpha},$$

ここで

$$d^{(1/2)}_{m'm}=\begin{array}{c|cc} m' \backslash m & 1/2 & -1/2 \\ \hline 1/2 & \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \\ -1/2 & -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{array} \qquad (58.8)$$

j の値が任意の場合には，関数 ψ_{jm} は $2j$ 階の共変対称スピノールの成分と，公式 (57.6) によって結ばれている．$2j$ 階のスピノールの成分の変換行列は，スピノール添字の一つ一つにそれぞれ作用する $2j$ 個の行列 $\hat{D}^{(1/2)}$ の積である．掛け算を実行し，ふたたび関数 ψ_{jm} に戻ると，この関数の変換行列が次の形にえられる：

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=e^{im'\gamma}d^{(j)}_{m'm}(\beta)e^{im\alpha}, \qquad (58.9)$$

---

1) (58.7) の中の行列の添字は，行（横）に並んだ関数 $\psi_{im'}$ に行列 $\hat{D}^{(j)}$ の列をかけてゆく順序にちょうど並んでいる．記号的に書けば，等式 (58.7) は，$\psi_{jm}=(\psi'_j\hat{D}^{(j)})_m$ と書くべきであろう．これは (56.13) の書き方と一致している．

この中で，関数 $d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ は次の公式によって与えられる[1]：

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta)=\left[\frac{(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{m'+m}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m}P^{(m'-m,\,m'+m)}_{j-m'}(\cos\beta), \tag{58.10}$$

ここで，

$$P^{(a,b)}_n(\cos\beta)=\frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-\cos\beta)^{-a}(1+\cos\beta)^{-b} \times\left(\frac{d}{d\cos\beta}\right)^n[(1-\cos\beta)^{a+n}(1+\cos\beta)^{b+n}] \tag{58.11}$$

は，いわゆる**ヤコビの多項式**である[2]．そして，次の関係に注意しよう：

$$P^{(a,b)}_n(-\cos\beta)=(-1)^n P^{(b,a)}_n(\cos\beta). \tag{58.12}$$

関数 $d^{(j)}_{m'm}$ は，表式（58.11）と（58.12）を用いればたどることのできる多くの対称性をもっている．しかし，回転変換の係数としてのその定義から，直接導く方がもっと簡単である．

回転変換の行列である行列 $\hat{D}^{(j)}$ はユニタリである．回転（α,β,γ）の逆変換は回転（$-\gamma,-\beta,-\alpha$）であるから，実の行列 $\hat{d}^{(j)}$ に対して，次の関係式がえられる．

$$d^{(j)}_{m'm}(-\beta)=d^{(j)}_{mm'}(\beta). \tag{58.13}$$

さらに，次の等式も成り立っている：

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta)=d^{(j)}_{-m,-m'}(\beta), \tag{58.14}$$

$$\begin{gathered} d^{(j)}_{m'm}(\pi)=(-1)^{j+m}\delta_{m',-m}, \\ d^{(j)}_{m'm}(-\pi)=(-1)^{j-m}\delta_{m',-m}, \qquad d^{(j)}_{m'm}(0)=\delta_{m'm}. \end{gathered} \tag{58.15}$$

$j=1/2$ の場合には，これらの式は（58.8）から見て明らかである．また，任意の j の場合へこれらの式を一般化することも，上述の変換行列の組み立て方から自明である．

角度 $\pi-\beta$ の回転を，角度が π と $-\beta$ の二つの続いた回転として実行すると，

$$d^{(j)}_{m'm}(\pi-\beta)=\sum_{m''}d^{(j)}_{m'm''}(\pi)d^{(j)}_{m''m}(-\beta)=(-1)^{j-m'}d^{(j)}_{-m'm}(-\beta)$$

---

1) 計算の手続きは次の教科書に求めることができる：A. R. Edmonds, *Angular momentum in quantum mechanics*, Princeton, 1957.（58.9）による関数 $D^{(j)}_{m'm}$ の定義は，エドモンズの本でなされている定義と異なり，右辺の α と γ の順序が逆になっている（いまのべている求め方ではこの方がより自然である）．

2) この多項式と超幾何級数の関係については，§e（公式（e.11））参照．

あるいは，(58.13) を用いて：

$$d^{(j)}_{m'm}(\pi-\beta)=(-1)^{j-m'}d^{(j)}_{m',-m'}(\beta). \tag{58.16}$$

同じ軸のまわりに2度回転を行なった結果は，回転の順序には依存しない．それゆえ，回転 $-\beta$ と π を逆の順序に行なっても，同じ結果がえられるはずである．これを行ない，その答を (58.16) と比較すると，次の関係がえられる．

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta)=(-1)^{m'-m}d^{(j)}_{-m',-m}(\beta). \tag{58.17}$$

(58.17), (58.14) および (58.13) から次の式が導かれる：

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta)=(-1)^{m'-m}d^{(j)}_{mm'}(\beta)=(-1)^{m'-m}d^{(j)}_{m'm}(-\beta). \tag{58.18}$$

(58.13)-(58.18) に基づいて，完全な関数 $\hat{D}^{(j)}$ のいろいろの対称性を書き下すことができる．ここではとくに，次の複素共役な関数の表式を書いておこう：

$$D^{(j)*}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=D^{(j)}_{m'm}(-\alpha,\beta,-\gamma)=(-1)^{m'-m}D^{(j)}_{-m',-m}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{58.19}$$

数学的に見れば，行列 $\hat{D}^{(j)}$ は，回転群の $2j+1$ 次元のユニタリ既約表現である（以下，§98 を参照）．このことからただちに次の直交規格関係が導かれる．

$$\int D^{(j_1)*}_{m_1'm_1}(\alpha,\beta,\gamma)D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(\alpha,\beta,\gamma)\frac{d\omega}{8\pi^2}=\frac{1}{2j_1+1}\delta_{j_1j_2}\delta_{m_1m_2}\delta_{m_1'm_2'}, \tag{58.20}$$

ここで，$d\omega=\sin\beta d\alpha d\beta d\gamma$ である．

添字 m と m' についての関数の直交性は，因子 $\exp\{i(m\alpha+m'\gamma)\}$ によって保障されている．添字 j についての直交性の方は，関数 $d^{(j)}_{m'm}$ の次の直交性と結ばれている：

$$\int_0^\pi d^{(j_1)}_{m'm}(\beta)d^{(j_2)}_{m'm}(\beta)\frac{\sin\beta d\beta}{2}=\frac{1}{2j_1+1}\delta_{j_1j_2}. \tag{58.21}$$

最後に，参照に役立つように，パラメーターがいくつかの特別な値の場合の関数 $d^{(j)}_{m'm}$ の表式を導いておこう．$j=1$ の場合には，次のようになる：

$d^{(1)}_{m'm}(\beta)=$ (58.22)

$m' \backslash m$	1	0	-1
1	$\frac{1}{2}(1+\cos\beta)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$	$\frac{1}{2}(1-\cos\beta)$
0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$	$\cos\beta$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$
-1	$\frac{1}{2}(1-\cos\beta)$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$	$\frac{1}{2}(1+\cos\beta)$

$j=l$ が整数で $m'=0$ の場合には，公式（58.10）と（58.11）から，

$$d^{(l)}_{0m}(\beta)=(-1)^m d^{(l)}_{m0}(\beta)=(-1)^m\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\beta) \qquad (58.23)$$

がえられる．この公式の由来は最初の定義（58.7）から容易にたどることができる．（58.7）の右辺の関数 $\psi_{jm'}$ の値を z' 軸上の値にとろう．この上では，（$j=l$の場合）

$$Y_{lm'}(\boldsymbol{n}_{z'})=i^l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m'0} \qquad (58.24)$$

となる．このとき，左辺の関数 ψ_{jm} は，z' 軸の方向を表わす球角 $\varphi\equiv\alpha$, $\theta\equiv\beta$ を引数とする球関数 $Y_{lm}(\beta,\alpha)$ となる．（58.24）を（58.7）の中に代入すると，

$$Y_{lm}(\beta,\alpha)=i^l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}D^{(l)}_{0m}(\alpha,\beta,\gamma) \qquad (58.25)$$

となる．これは（58.23）と同等である．

最後に，添字 m, m' のうちの一つが，許される最大値をもつ場合の，関数 $d^{(j)}$ の表式を引用しておこう．

$$\begin{aligned}d^{(j)}_{jm}(\beta)&=(-1)^{j-m}d^{(j)}_{mj}\\&=\left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{j+m}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{j-m}.\end{aligned} \qquad (58.26)$$

§ 59. 粒子の部分偏極

z 軸の方向を適当に選べば，いつでも，与えられたスピノール ψ^λ——スピン 1/2 の粒子の波動関数——の成分のうちの一つ（たとえば ψ^2）をゼロにすることが可能である．これは空間における方向が2個の量（角度）によって決められることから明らかである．すなわちわれわれが自由にできるパラメーターの数は，ゼロにしようとする量（複素量 ψ^2 の実部と虚部）の数とちょうど一致しているからである．

この物理的意味は，もしもスピン 1/2 の粒子（話をはっきりさせるために電子について述べる）があるスピン波動関数によって記述される状態にあれば，その粒子のスピンの投影が確定値 1/2 をとるような方向が空間に存在するということである．このような状態では電子は**完全に偏極**しているということができる．

しかしまた**部分偏極**と呼ぶべき電子の状態も存在する．このような状態は波動関数では記述されず，密度行列ではじめて記述される．すなわちそれは（スピンに関する）混合状態である（§ 14 参照）．

電子のスピン（あるいは**偏極**）密度行列は2階のスピノール $\rho^{\lambda}{}_{\mu}$ であり，次の条件で規格化されている：

$$\rho^{\lambda}{}_{\lambda}=\rho^{1}{}_{1}+\rho^{2}{}_{2}=1 \tag{59.1}$$

また《エルミート》性の条件

$$(\rho^{\lambda}{}_{\mu})^{*}=\rho^{\mu}{}_{\lambda} \tag{59.2}$$

も満たしている．電子の純粋（すなわち完全偏極）スピン状態の場合には，スピノール $\rho^{\lambda}{}_{\mu}$ は波動関数の成分 ψ^{λ} の積になる：

$$\rho^{\lambda}{}_{\mu}=\psi^{\lambda}(\psi^{\mu})^{*}. \tag{59.3}$$

密度行列の《対角》成分は電子スピンの z 軸への投影が値 $+1/2$ および $-1/2$ をとる確率を定義している．したがってこの投影の平均値は

$$\bar{s}_{z}=\frac{1}{2}(\rho^{1}{}_{1}-\rho^{2}{}_{2})$$

である．あるいは (59.1) を考慮して

$$\rho^{1}{}_{1}=\frac{1}{2}+\bar{s}_{z},\qquad \rho^{2}{}_{2}=\frac{1}{2}-\bar{s}_{z} \tag{59.4}$$

となる．

純粋状態では量 $s_{\pm}=s_{x}\pm is_{y}$ の平均値は次のように計算される：

$$\bar{s}_{+}=\psi^{\lambda *}\hat{s}_{+}\psi^{\lambda},\qquad \bar{s}_{-}=\psi^{\lambda *}\hat{s}_{-}\psi^{\lambda}.$$

(55.6) と (55.7) によれば演算子 $\hat{s}_{\pm}$ は行列表示で

$$\hat{s}_{+}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix},\qquad \hat{s}_{-}=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

とあらわされるので

$$\bar{s}_{+}=\psi^{1*}\psi^{2},\qquad \bar{s}_{-}=\psi^{2*}\psi^{1}$$

となる．したがって混合状態では

$$\rho^{1}{}_{2}=\bar{s}_{-},\qquad \rho^{2}{}_{1}=\bar{s}_{+} \tag{59.5}$$

となる．

公式 (59.4) と (59.5) は，パウリ行列を用いると，一まとめにして次のように書くことができる：

$$\rho^{\lambda}{}_{\mu}=\frac{1}{2}(\delta^{\lambda}_{\mu}+2\hat{\sigma}^{\lambda}{}_{\mu}\bar{\boldsymbol{s}}). \tag{59.6}$$

こうして電子の分極密度行列のすべての成分はスピン・ベクトルの成分の平均値であらわされることがわかった．いいかえれば，実ベクトル $\bar{\boldsymbol{s}}$ はスピン 1/2 の粒子の偏極性を完全に決めている．極限の完全偏極の場合には，このベクトルの成分の一つは（軸の方向を適当に選んだとき）1/2 に，他の二つはゼロに等しい．逆の場合の非偏極状態では，3成分はすべてゼロに等しい．任意の部分偏極をもつ一般の場合には，任意の座標系に対して，電子の**偏極率**と呼ぶべき量

$$\rho=2(\bar{s}_x^2+\bar{s}_y^2+\bar{s}_z^2)^{1/2}$$

について，不等式 $0\leqq\rho\leqq1$ が成り立っている．

任意のスピン s をもつ粒子に対する密度行列は $4s$ 階のスピノール $\rho^{\lambda\mu\cdots}{}_{\rho\sigma\cdots}$ であり，はじめの $2s$ 個の添字についてもあとの $2s$ 個の添字についても対称であって，次の条件を満たしている：

$$\rho^{\lambda\mu\cdots}{}_{\lambda\mu\cdots}=1, \tag{59.7}$$

$$(\rho^{\lambda\mu\cdots}{}_{\rho\sigma\cdots})^{*}=\rho^{\rho\sigma\cdots}{}_{\lambda\mu\cdots}. \tag{59.8}$$

密度行列の独立な成分の数を勘定するために，添字 $\lambda,\mu,\cdots$（あるいは添字 $\rho,\sigma,\cdots$）の値の可能な選び方のうち本質的に異なるのは $2s+1$ 個だけであることに注意する．またスピノールの成分 $\rho^{\lambda\mu\cdots}{}_{\rho\sigma\cdots}$ は一つの関係（59.7）で結ばれていることを考慮すると，異なる成分の数は $(2s+1)^2-1=4s(s+1)$ に等しいことがわかる．たとえこれらの成分が複素量であっても，（59.8）の関係があるので粒子の部分偏極の状態を特徴づける独立な量の総数はこのために増えることはなく，したがって $4s(s+1)$ である[1]．比較のために粒子の完全偏極の状態は全部で $4s$ 個の量（一つの規格化条件で束縛され，また状態の記述にとって重要でない一つの共通位相を含む波動関数 $\psi^{\lambda\mu\cdots}$ の $2s+1$ 個の複素成分）で記述されることを指摘しておこう．

あらゆる $4s$ 階のスピノールと同じく，スピノール $\rho^{\lambda\mu\cdots}{}_{\rho\sigma\cdots}$ は $4s, 4s-2, \cdots, 0$ 階の既約テンソルの組と同等である．いまの場合にはこれらの階数のそれぞれに一つのテンソルしか存在しない．なぜならスピノール $\rho^{\lambda\mu\cdots}{}_{\rho\sigma\cdots}$ が対称なの

1）これらの量を与えることは，ベクトル $\boldsymbol{s}$ の成分の平均値，そしてすべての成分のベキおよび $2, 3, \cdots, 2s$ 個の成分の積の内，より低次のベキに還元できないものの平均値を与えることと同等である（§55，問題3参照）．

で，それを各階数で縮約する方法は，次の一つしかないからである．すなわち，添字 $\lambda, \mu, \cdots$ のうちの（任意の）1個と $\rho, \sigma, \cdots$ のうちの1個についての縮約である．さらにスカラー（ゼロ階のテンソル）は一般には存在しない．条件（59.7）によって1に還元されるからである．

§ 60. 時間反転とクラマースの定理

量子力学では時間符号の変化に対する運動の対称性は，次のようにいいあらわすことができる：ψ が系のある定常状態の波動関数であれば，《時間反転した》波動関数（これを ψ^{rev} と書く）もこれと同じエネルギーの可能な状態を記述している．§18の終わりに指摘したように，ψ^{rev} は複素共役な関数 ψ^* と一致する．このような単純な言い方が当てはまるのは，粒子のスピンを考えない波動関数の場合だけである．スピンが存在する場合にはもっと精密化が必要である．

スピン s をもつ粒子の波動関数を（$2s$ 階の）反変スピノール $\psi^{\lambda\mu\cdots}$ の形にあらわそう．しかし複素共役な関数 $\psi^{\lambda\mu\cdots *}$ に移ると，共変スピノールの成分として変換する一組の量が得られる．それゆえ時間反転の操作は，波動関数 $\psi^{\lambda\mu\cdots}$ から，その共変成分が

$$\psi^{\mathrm{rev}}_{\lambda\mu\cdots}=\psi^{\lambda\mu\cdots *} \tag{60.1}$$

によって定義される新しい波動関数へ移ることに対応している．

添字 $\lambda, \mu, \cdots$ の値が一組与えられたとき，共変および反変スピノールの成分は，符号が逆の二つの角運動量投影値に対応している．したがって関数 $\psi_{s\sigma}$ であらわせば時間反転は $\psi_{s\sigma}$ から $\psi_{s,-\sigma}$ への移行に対応する．時間符号を変えれば角運動量の向きも変わるから，これは当然のことであろう．正確な対応関係は（60.1）から決められる：

$$\psi^{\mathrm{rev}}_{s,-\sigma}=\psi^*_{s\sigma}(-1)^{s-\sigma}. \tag{60.2}$$

いいかえれば，時間反転の操作によって要請される置きかえ $\psi_{s\sigma}\rightarrow\psi^*_{s\sigma}$ は次の置きかえを意味している[1]．

$$\psi_{s\sigma}\rightarrow\psi_{s,-\sigma}(-1)^{s-\sigma}. \tag{60.3}$$

この操作を2度繰返すと

1）（28.9）にしたがう球関数の複素共役の規則と一般規則（60.3）の対応に注意しよう．

$$\psi_{s\sigma}\to\psi_{s,-\sigma}(-1)^{s-\sigma}\to\psi_{s\sigma}(-1)^{s-\sigma}(-1)^{s+\sigma}=\psi_{s\sigma}(-1)^{2s}$$

がえられる．このように，時間反転を2度行なって，波動関数がもとの値に戻るのは，整数スピンの場合のみである．半整数スピンの場合には，二度の時間反転は波動関数の符号を変えてしまう．

相互作用している粒子の任意の体系を考えよう．このような系の軌道角運動量とスピン角運動量は相対論的相互作用を考慮すると，一般にはそれぞれ別々には保存されない．保存されるのは全角運動量Jだけである．もしも外場が何もなければ，系の各エネルギー準位は$(2J+1)$重に縮退している．外場が加えられると，この縮退は一般には解かれてしまう．このときこの縮退が完全にとれて，系が単純準位のみをもつようになるかどうかという問題が起こる．この問題は時間反転に対する対称性と密接に関係している．

古典電気力学では，時間符号の変化に対して方程式の不変性が成り立っている[1]．ただしそのとき，電場は不変に保ち，磁場は符号を変えなければならない．この運動の基本的性質は量子力学においても保たれなければならない．したがって時間反転に対する対称性は閉じた系だけでなく，（磁場がなければ）あらゆる外部電場の中の系についても成り立っている．

系の波動関数は，すべての粒子のスピンの和の2倍に等しいnを階数とするスピノール$\psi^{\lambda\mu\cdots}$であらわされる$(n=2\sum s_a)$．ただしこの和は系の全スピンSとは一致しないかもしれない．上述のことから，波動関数とそれの時間を反転した関数は，任意の電場の中で同じエネルギーの状態に対応すると言ってよい．エネルギー準位が縮退しないためには，これらの状態が互いに同等であることがどうしても必要である．すなわち対応する波動関数は定数因子を除いて互いに一致しなければならない．このときもちろん両者は同じスピノール（の共変または反変成分）の形にあらわされるはずである．

そこで$\psi^{\mathrm{rev}}_{\lambda\mu\cdots}=C\psi_{\lambda\mu\cdots}$あるいは(60.1)によって

$$\psi^{\lambda\mu\cdots *}=C\psi_{\lambda\mu\cdots} \tag{60.4}$$

と書こう．ここでCは定数である．この等式の両辺の複素共役をとると次の式が得られる：

$$\psi^{\lambda\mu\cdots}=C^*\psi^*_{\lambda\mu\cdots}.$$

1) 第II巻『場の古典論』§17参照．また§111の最後の脚注も参照．

この等式の左辺の添字を肩から下し，それに応じて右辺の添字を肩へ上げよう．これはこの等式の両辺に $g_{\alpha\lambda}g_{\beta\mu}\cdots$ を掛けてから $\lambda, \mu, \cdots$ について加えることを意味している．このとき右辺では次の関係を使う必要がある：

$$g_{\alpha\lambda}g_{\beta\mu}\cdots=(-1)^n g^{\lambda\alpha}g^{\mu\beta}\cdots.$$

その結果次の式が得られる：

$$\psi_{\lambda\mu\ldots}=C^*(-1)^n\psi^{\lambda\mu\cdots*}.$$

(60.4) の $\psi^{\lambda\mu\cdots*}$ をこれに代入すれば

$$\psi_{\lambda\mu\ldots}=(-1)^n CC^*\psi_{\lambda\mu\ldots}.$$

が得られる．この等式は恒等的に満たされなければならない．すなわち $(-1)^n CC^*=1$ でなければならない．しかし $|C|^2$ は必ず正なので，これが可能なのは n が偶数（すなわち和 $\sum s_a$ が整数）の場合だけである．n が奇数（すなわち $\sum s_a$ の値が半整数）の場合には条件 (60.4) は満たされない[1]．

したがって粒子スピンの和が整数値の系でのみ，電場は縮退を完全に解くことができるという結論になる．スピンの和が半整数の系ではすべての準位は任意の電場の中で2重に縮退していて，同じエネルギーの二つの異なる状態は複素共役なスピノールに対応している[2] (H. A. Kramers, 1930).

さてもう一つ数学的性格を帯びた注意をしておこう．C を実定数とする(60.4) の形の関係は，数学的に見ればスピノール成分に一組の実の量を対応させることのできるための条件である．これはスピノールの《実数性》のための条件と呼ぶことができる[3]．n が奇数のときに関係 (60.4) を満たすことができないということは，いかなる奇数階のスピノールにも実の量を対応させることができないことを意味している．これとは逆に，n が偶数のときは条件 (60.4) が満たされ，C を実にすることができる．たとえば2階の対称スピノールが，条件 (60.4) で $C=1$ と置いた式

$$\psi^{\lambda\mu*}=\psi_{\lambda\mu}$$

1) 和 $\sum s_a$ が整数（半整数）の場合には，系の全スピンの許されるすべての値も整数（半整数）である．

2) もしも電場が高い対称性（立方対称性）をもっていれば，4重の縮退が起こりうる（§99とそこの問題参照）．

3) スピノールの実数性を文字通りの意味で（《　》なしで，訳者）いうのは一般には無意味である．なぜならば複素共役なスピノールは互いに異なる変換則をもっているからである．（したがって，複素共役なスピノールから，文字通り実数のスピノールをつくることはできない．訳者）

を満たすならば，これに実ベクトルを対応させることができる（これは公式(57.8)-(57.9) を用いれば容易に確かめられる）．一般に条件 (60.4) で $C=1$ と置いたものは任意の偶数階の対称スピノールの《実数性》のための条件である．

第9章　粒子の同等性

§ 61. 同種粒子の無差別性の原理

古典力学では同種粒子（たとえば電子）は，その物理的性質が同等であるにもかかわらず，自己の《個別性》をすこしも失わない．すなわち与えられた物理的体系を構成している粒子をある時刻に《番号づけ》て，それから各粒子の運動をその軌道に沿って追うことができる．そして任意の時刻に粒子を区別することができる．

ところが量子力学では事情はまったく異なっている．すでに何度も述べたように，不確定性原理のために電子の軌道という概念はまったく意味を失っている．もしも現在の時刻に電子の位置が正確に知れたとしても，それに続く時刻にはその座標はもはや一般にいかなる確定値もとらない．したがって電子をある時刻に局在化してそれに番号をつけても，それは以後の時刻の電子の識別の目的には何の役にも立たない．別の時刻に空間のある点に電子の一つを局在化しても，一体どの電子がこの点に来たのかを示すことはできない．

このように量子力学では，同種粒子の各々を別々に追いかけてそれらを区別する可能性は原理的にまったく存在しない．量子力学では同種粒子はその《個別性》をまったく失っているということができよう．この物理的性質に関する粒子の同種性はきわめて徹底した性格をもっている．それは粒子の完全な無差別性を導くものである．

このいわゆる同種粒子の**無差別性の原理**は，同種粒子からなる系の量子力学的研究において基本的な役割を演じている．全部で二つの粒子からなる系の考察から始めよう．粒子の同等性のために，二つの粒子の単なる互換によって得られる系の状態は，物理的にはまったく同等でなければならない．このことは，系の波動関数がこのような互換の結果として重要でない位相因子しかかえないことを意味している．$\psi(\xi_1, \xi_2)$ を系の波動関数とし，ξ_1, ξ_2 をさしあたって

各粒子の3個の座標とスピン投影の組をあらわすものとしよう．すると

$$\psi(\xi_1, \xi_2)=e^{i\alpha}\psi(\xi_2, \xi_1)$$

でなければならない．ここで α はある実の定数である．二度目の互換の結果，われわれは最初の状態に戻るが，関数 ψ の方は $e^{2i\alpha}$ 倍されている．したがって $e^{2i\alpha}=1$ または $e^{i\alpha}=\pm1$ でなければならない．したがって $\psi(\xi_2, \xi_1)=\pm\psi(\xi_2, \xi_1)$ である．

かくて波動関数には対称（つまり粒子の互換によってまったく変わらない）か，または反対称（互換によって符号が変わる）かどちらか二つの可能性しかないという結果に到達する．同じ系のすべての状態の波動関数は，同じ対称性を持たなければならないことは明らかである．さもないと，異なる対称性の状態の重ね合わせであらわされる状態の波動関数は対称でも，反対称でもないということになるからである．

この結果はただちに任意の数の同種粒子からなる系に一般化される．実際，粒子の同等性のために，もしもその粒子の任意の一対がたとえば対称な波動関数によって記述される性質をもつとすると，このような粒子の他のすべての対も同じ性質をもつことは明らかである．したがって同種粒子の波動関数は，任意の粒子対の互換に対して（したがって粒子間のあらゆる互換に対して）まったく変わらないか，あるいは各対の互換に対して符号を変えるかどちらかである．第一の場合は**対称**な波動関数と呼び，第二の場合は**反対称**な波動関数と呼ぶ．

対称波動関数によって記述されるか，それとも反対称波動関数によって記述されるかの性質は，粒子の種類に依存している．反対称関数によって記述される粒子のことを**フェルミ=ディラック統計**に従う粒子，あるいは**フェルミオン（フェルミ粒子）**と呼び，対称関数によって記述される粒子のことを**ボーズ=アインシュタイン統計**に従う粒子，あるいは**ボゾン（ボーズ粒子）**と呼ぶ[1]．

1）この用語は，それぞれ反対称または対称な波動関数をもつ粒子からなる理想気体を記述する統計の名称からきている．実際には，これには統計の違いばかりでなく，本質的には力学の違いが関係している．フェルミ統計はフェルミ（E. Fermi）により1926年に電子に対して提案され，その量子力学との関係はディラック（P. A. M. Dirac）によって明らかにされた（1926年）．ボーズ統計はボーズ（S. N. Bose）により光量子に対して提案され，アインシュタイン（A. Einstein）により一般化された（1924年）．

相対論的量子力学の法則から示すことができるように（第Ⅳ巻『相対論的量子力学』§25 参照），粒子が従う統計はそのスピンと一義的に関連している．すなわち半整数スピンをもつ粒子はフェルミオンであり，整数スピンをもつ粒子はボゾンである．

複合粒子の統計は，その組成に含まれる素フェルミ粒子の数の偶奇によって決定される．実際，二つの同種の複合粒子を互換することは，同種素粒子のいくつかの対を同時に互換することと同等である．ボーズ粒子の互換は一般に波動関数を変えないが，フェルミ粒子の互換は波動関数の符号を変える．したがって素フェルミ粒子を奇数個含む複合粒子はフェルミ統計に従い，偶数個含む複合粒子はボーズ統計に従う．この結果はもちろん上に述べた一般規則と一致している．なぜなら複合粒子は，それを構成する半整数スピンの粒子の数が偶であるか奇であるかに従って，整数または半整数スピンをもつからである．

したがって奇の質量数をもつ（すなわち奇数個の陽子と中性子からなる）原子核はフェルミ統計に従い，また偶の質量数をもつ原子核はボーズ統計に従う．原子核の他に電子も含んでいる原子に対する統計は，明らかに質量数と原子番号の和の偶奇性によって決まる．

N 個の同種粒子からなる系を考察しよう．粒子間の相互作用は無視できるものとする．また粒子がそれぞれ別々に占めることのできる異なる定常状態の波動関数を $\psi_1, \psi_2, \cdots$ としよう．全体としての系の状態は，個々の粒子が占める状態の番号を列挙することにより指定することができる．どのようにして関数 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ から系全体の波動関数 ψ を組み立てるべきかという問題が生ずる．

いま $p_1, p_2, \cdots, p_N$ を個々の粒子が占める状態の番号であるとしよう（これらの番号の中に同じものがあってもよい）．ボゾンの系に対して波動関数 $\psi(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N)$ は，

$$\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\cdots\psi_{p_N}(\xi_N) \tag{61.1}$$

なる形の積において異なる添字 $p_1, p_2, \cdots$ にあらゆる可能な置換を施したものの和であらわされる．このような和は明らかに要求される対称の性質をもっている．したがって異なる状態 $(p \neq p_2)$ にある 2 粒子からなる系に対しては

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2) + \psi_{p_1}(\xi_2)\psi_{p_2}(\xi_1)] \tag{61.2}$$

となる．

$1/\sqrt{2}$ なる因子は規格化のために導入された（すべての関数 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ は相互に直交し，規格化されているものと仮定する）．任意の粒子数 N からなる系のような一般的な場合には，規格化された波動関数は

$$\psi=\left(\frac{N_1!N_2!\cdots}{N!}\right)^{1/2}\sum\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\cdots\psi_{p_N}(\xi_N) \tag{61.3}$$

となる．ここで和は添字 $p_1, p_2, \cdots, p_N$ の中の異なるもののあらゆる置換に対してとり，数 N_i はこれらすべての添字のうちいくつが同じ値 i をとるかを示している（ここで $\sum N_i=N$ である）．自乗 $|\psi|^2$ の $d\xi_1 d\xi_2\cdots d\xi_N$ に関する積分において，和の各項の絶対値の自乗を除いて，他の項はすべてゼロとなる[1]．(61.3) の和の項の総数はもちろん $N!/N_1!N_2!\cdots$ であるので，これから (61.3) における規格化係数が得られる．

フェルミオンの系に対して波動関数 ψ は (61.1) の積の反対称結合であらわされる．したがって2粒子からなる系に対しては

$$\psi(\xi_1, \xi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)-\psi_{p_1}(\xi_2)\psi_{p_2}(\xi_1)] \tag{61.4}$$

となる．N 粒子の一般的な場合には，系の波動関数は行列式の形に書くことができる：

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_1}(\xi_N)\\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_2}(\xi_N)\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_N}(\xi_N)\end{vmatrix}. \tag{61.5}$$

二つの粒子の互換はここでは行列式の二つの列の互換に対応し，その結果これは符号を変える．

式 (61.5) より次のような重要な結果が導かれる．もしも番号 $p_1, p_2, \cdots$ のうちで二つが同じならば，行列式の二つの行が同じになり，全行列は恒等的にゼロとなる．行列式がゼロでないのは，すべての番号 $p_1, p_2, \cdots$ が異なる場合だけである．したがって同種のフェルミオンの系では，二つ（あるいはそれ以上）の粒子が同時に同じ状態を占めることはできない．これがいわゆる**パウリの原**

---

1) ξ に関する積分は（本節および§64, §65では）座標に関する積分と σ に関する和であると約束する．

理 (W. Pauli, 1925) である.

§ 62. 交換相互作用

シュレーディンガー方程式の中で粒子にスピンの存在が考慮されていないことは，この方程式およびこれを用いて得られるすべての結果の価値をけっしてそこなうものではない．それは粒子の電気的相互作用がそのスピンに依存しないからである[1]. 数学的にはこれは，電気的に相互作用している粒子系のハミルトニアンは（磁場が存在しなければ）スピン演算子を含まず，したがってそれを波動関数に演算してもスピン変数には何の影響も及ぼさないことを意味している．したがって実際にシュレーディンガー方程式を満足するのは波動関数の各スピノール成分である：いいかえると粒子系の波動関数は次の積の形に書くことができる：

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \chi(\sigma_1, \sigma_2, \cdots)\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots).$$

ここで関数 φ は粒子の座標のみに依存し，関数 χ はスピンのみに依存する．前者を**座標**または**軌道**波動関数と呼び，後者を**スピン**波動関数と呼ぼう．シュレーディンガー方程式はもともと関数 χ を任意のままに残して，座標関数 φ のみを決定するものである．われわれが粒子のスピン自身に興味をもたない場合にはいつでも，前章まで行なってきたように波動関数として一つの座標関数のみを考えてシュレーディンガー方程式を適用してよい．

しかし粒子の電気的相互作用がそのスピンに依存しないにもかかわらず，系のエネルギーはその全スピンに対して特異な依存性をもつことがわかる．これも結局のところ同種粒子の無差別性の原理に由来するものである．

全部で二つの同種粒子からなる系を考察しよう．シュレーディンガー方程式を解いた結果，一連のエネルギー準位が得られる．そしてそれには一定の対称または反対称の座標波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ が対応する．実際，粒子の同等性のために系のハミルトニアンは（したがってシュレーディンガー方程式の方も）粒子の互換に対して不変である．そこでもしもエネルギー準位が縮退していなければ，座標 $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の互換に対して関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は定数因子だけ変わる．さら

---

1) このことはわれわれが非相対論的近似を問題とする場合に限って正しい．相対論的効果を考慮すると荷電粒子の相互作用はスピンに依存するようになる．

にもう一度互換を行なうことによって，この因子はちょうど ± 1 に等しくなければならないことがわかる[1)].

はじめに粒子はゼロのスピンをもつと仮定しよう．このような粒子に対してはスピン因子は一般に存在せず，波動関数は単に一つの座標関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ に帰着される．この関数は対称でなければならない（なぜならばスピンがゼロの粒子はボーズ統計に従うからである）．したがってシュレーディンガー方程式を形式的に解いて得られるエネルギー準位のすべてが実際に存在できるわけではない．そのうちの反対称関数 φ に対応する準位は，いま考えている系では起こりえない．

2個の同種粒子の互換は座標系の反転操作と同等である（反転の中心は両粒子を結ぶ線分の中点にとる）．他方反転の結果波動関数 φ には，$(-1)^l$ が掛けられるべきである．ここで l は両粒子の相対運動の軌道角運動量である（§30参照）．この考察と上述のことを比較すると，スピン・ゼロの2個の同種粒子からなる系は偶の軌道角運動量しかもちえないという結論に達する．

つぎに，系が1/2のスピンをもつ2粒子（たとえば電子）からなるものとしよう．すると系の全波動関数（すなわち関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ とスピン関数 $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ との積）は両粒子の互換に関して必ず反対称でなければならない．したがって座標関数が対称（反対称）のときはスピン関数は反対称（対称）でなければならない．スピン関数をスピノールの形，すなわちその各添字が1電子のスピンに対応するような2階のスピノール $\chi^{\lambda\mu}$ の形に書こう．両粒子のスピンに関して対称な関数には対称スピノール（$\chi^{\lambda\mu}=\chi^{\mu\lambda}$）が対応し，反対称な関数には反対称スピノール（$\chi^{\lambda\mu}=-\chi^{\mu\lambda}$）が対応している．ところが2階の対称スピノールは全スピンが1に等しい系を記述し，反対称スピノールはスピン・ゼロに対応するスカラーに帰着されることをわれわれは知っている．

したがって次の結果に到達する：シュレーディンガー方程式の対称解 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ に対応するエネルギー準位が実現し得るのは，系の全スピンがゼロに等しい場合，つまり両電子のスピンが《反平行に》向いてその和がゼロとなる場合である．また反対称関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ に関連したエネルギーの値は全スピンが1で

---

1)　縮退が存在する場合には，与えられた準位に属する関数の適当な線形結合を選んで，やはりこの条件を満足するようにできる．

あることを要求する．つまり両電子のスピンは《平行》でなければならない．

いいかえると，電子系のとり得るエネルギーの値は，その全スピンに依存している．したがって，この依存性を導き出すような粒子間の特別な相互作用について論ずることが可能である．この 相互作用 は **交換相互作用** と呼ばれている． これは純粋の量子効果をあらわしており，（スピンと同じく）古典力学の極限へ移行すると完全になくなる．

これまで考察した2電子系の場合には，次の事情が特徴的である．すなわち各エネルギー準位には，全スピンの確定値0あるいは1が対応する．スピンの値とエネルギー準位とのあいだのこのような一意的対応は，あとで見るように(§63)， 任意の数の電子からなる系でも保存される．しかし1/2より大きいスピンをもつ粒子からなる系では，このことは成り立たない．

任意のスピン s をもつ2粒子からなる系を考察しよう．そのスピン波動関数は $4s$ 階のスピノール

$$\chi^{\overbrace{\lambda\mu\cdots}^{2s}\overbrace{\rho\sigma\cdots}^{2s}}$$

であり，その添字の半数 $(2s)$ は一つの粒子のスピンに対応し，他の半数はもう一つの粒子のスピンに対応する．これらの各組の中の添字に関してスピノールは対称である． 2粒子の互換は，第1組 の 全部の添字 $\lambda, \mu, \cdots$ と第2組の添字 $\rho, \sigma, \cdots$ をそっくり置換することに対応する．全スピン S をもつ系の状 態 の スピン関数を得るためには，このスピノールを $2s-S$ 対の添字に関して縮約しなければならない（各対には $\lambda, \mu, \cdots$ のうちの一つと $\rho, \sigma, \cdots$ のうちの一つの添字が含まれる）．また残った添字に関しては対称化しなければならない． その結果 $2S$ 階の対称スピノールを得る．

ところがすでに知っているように，添字の対に関してスピノールを縮約することはこれらの添字に関して反対称な結合をつくることを意味する*）． したがって粒子を互換するとスピン波動関数は $(-1)^{2s-S}$ 倍される．

他方， 2粒子系の全波動関数は粒子を互換すると $(-1)^{2s}$ 倍されるべき である（すなわち，s が整数のときは $+1$ 倍され，半整数のときは -1 倍される）．このことから座標波動関数の粒子の互換に関する対称性は， S のみに依存する

*） ここでいう結合は （56.4） で定義される不変結合のことである． 明らかにこれは添字に関して反対称である．縮約と不変結合の関係は，（56.9） で与えられている（訳注）．

因子 $(-1)^S$ によって決められることがわかる．

こうして二つの同種粒子の系の座標波動関数は，全スピンが偶数のときは対称であり，奇数のときは反対称という結果に到達する．

すでに述べた粒子の互換と座標系の反転の間の関係を思い出せば，系はスピン S が偶数（奇数）ならば偶数（奇数）の軌道角運動量しかもてないことが結論される．

われわれは，ここで系のエネルギーのとり得る値と全スピンとの間のある種の依存性が明らかになるのを見たが，この依存性は必ずしも一意的ではない．対称（反対称）座標波動関数に対応するエネルギー準位は，あらゆる偶数（奇数）値の S に対して実現可能である．

偶数および奇数の S の値をもつ2粒子系のすべての異なる状態が一体いくつあるか勘定してみよう．S の値は $2s, 2s-1, \cdots, 0$ なる $2s+1$ 個の値をとる．与えられたそれぞれの S に対してスピンの z 成分の値の異なる $2S+1$ 個の状態がある［全部で $(2s+1)^2$ 個の異なる状態がある］．いま s を整数であるとしよう．すると $2s+1$ 個の S の値のうちで $s+1$ 個は偶数であり，s 個は奇数である．偶数の S をもつ状態の総数は和

$$\sum_{S=0,2\ldots,2s}(2S+1)=(2s+1)(s+1)$$

に等しい．残りの $s(2s+1)$ 個の状態は奇数の S をもつ．同じようにして，半整数の s のときには $s(2s+1)$ 個の状態は偶数の S をもち，$(s+1)(2s+1)$ 個の状態は奇数の S をもつことがわかる．

問　題

1.　2電子系のエネルギー準位の交換相互作用による分裂を求めよ．電子の相互作用は摂動として扱う．

解　各粒子は（その相互作用を考えなければ）軌道波動関数 $\varphi_1(\boldsymbol{r})$ および $\varphi_2(\boldsymbol{r})$ をもつ状態にあるとしよう．全スピン $S=0$ および $S=1$ をもつ系の状態には，それぞれ対称および反対称積

$$\varphi=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)\pm\varphi_1(\boldsymbol{r}_2)\varphi_2(\boldsymbol{r}_1)]$$

が対応する．これらの状態における粒子の相互作用演算子 $U(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)$ の平均値は $A\pm J$ である．ここで

$$A=\iint U|\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2|\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)|^2dV_1dV_2,$$

$$J=\iint U\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_1^*(\boldsymbol{r}_2)\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)\varphi_2^*(\boldsymbol{r}_1)dV_1dV_2$$

である（積分 J は**交換積分**と呼ばれる）．交換の特徴をもたない付加定数 A を無視すると，エネルギーの変化は $\varDelta E_0=J, \varDelta E_1=-J$ となる（添字は S の値を示す）．これらの値はスピンの**交換演算子**[1]

$$\hat{V}_{\text{exch}}=-\frac{1}{2}J(1+4\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2) \tag{1}$$

の固有値として表わすことができる（積 $\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2$ の固有値については§55の問題2参照）．

たとえば，もしも電子が異なる原子に属していれば，交換積分は原子間距離 R が増大するに従って指数関数的に減少する．被積分関数の構造から明らかなように，この積分は状態の波動関数 $\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)$ および $\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)$ の《重なり》によって決定される．離散スペクトルの状態の波動関数の減衰の漸近法則［(21.6) と比較せよ］を考慮すると

$$J\sim e^{-(\kappa_1+\kappa_2)R},\quad \kappa_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E_1|},\quad \kappa_2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E_2|}$$

となることがわかる．ここで E_1, E_2 は両原子における電子のエネルギー準位である．

2.　3電子系の場合について前問と同じ計算をせよ．

解　問題1の式 (1) の考えから，3電子系の二体間の交換相互作用の演算子を

$$\hat{V}_{\text{exch}}=-\sum J_{ab}\left(\frac{1}{2}+2\hat{\boldsymbol{s}}_a\hat{\boldsymbol{s}}_b\right) \tag{1}$$

の形に書こう．ここで和は 12, 13, 23 なる粒子対について行なわれる．数 σ_a, σ_b のいろいろな値の対をもつ状態間の演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}_a\hat{\boldsymbol{s}}_b$ の行列要素は，公式 (55.6) を用いて決定されて

$$\langle 1/2, 1/2|\boldsymbol{s}_a\boldsymbol{s}_b|1/2, 1/2\rangle=1/4,\quad \langle 1/2, -1/2|\boldsymbol{s}_a\boldsymbol{s}_b|1/2, -1/2\rangle=-1/4,$$
$$\langle 1/2, -1/2|\boldsymbol{s}_a\boldsymbol{s}_b|-1/2, 1/2\rangle=1/2$$

となる．

全スピンの投影 $M_S=\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3$ の許される最大値，すなわち $M_S=3/2$ に対応するエネルギーの決定から始めよう；こうすれば全スピン $S=3/2$ の状態のエネルギーは決まってしまう．演算子 (1) のこれに対応する対角行列要素を計算すると

$$\varDelta E_{3/2}=-(J_{12}+J_{13}+J_{23})$$

を得る．

つぎに $M_S=1/2$ の状態に移ろう．この M_S の値は，数 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ のうちどれを $-1/2$ に（そして他の2つを 1/2 に）するかによって3通りの方法で実現される．したがってこれらの状態に対して3次の永年方程式が得られるはずである．ところが，この方程式の根のうちの一つはすでに得られた $S=3/2$ の状態のエネルギーに対応しなければならない．したがって永年方程式は $\varDelta E-\varDelta E_{3/2}$ で割り切れなくてはならないことに気づけば，この計算はただちに簡単化される．このような事情により，この場合には3次方程式の

1) この演算子はディラックにより初めて導入された．

定数項は計算しなくてもすむ[1]．

すなわち，方程式の高次の項を計算すると

$$(\Delta E)^3+(J_{12}+J_{13}+J_{23})(\Delta E)^2$$
$$+[J_{12}J_{13}+J_{12}J_{23}+J_{13}J_{23}-(J_{12}^2+J_{13}^2+J_{23}^2)]\Delta E+\cdots=0$$

となる．これを $\Delta E+J_{12}+J_{13}+J_{23}$ で割ると，スピン $S=1/2$ の状態に対応する二つのエネルギー準位

$$\Delta E_{1/2}=\pm[J_{12}^2+J_{13}^2+J_{23}^2-J_{12}J_{13}-J_{12}J_{23}-J_{13}J_{23}]^{1/2}$$

を得る．

したがって全部で三つのエネルギー準位があるが，これは§63の問題1で行なう勘定と一致している．

3. 原子核 Be^8 はどのような状態にあれば2個の α 粒子に崩壊できるか．

解　α 粒子はスピンをもたないので，α 粒子2個の系は（全角運動量と一致する）偶の軌道角運動量しかもてない．そしてその状態は偶である．したがって指摘された崩壊は，偶の全角運動量をもつ原子核 Be^8 の偶状態からのみ起こる．

§63. 置換に関する対称性

全部で2個の粒子からなる系の考察からは，その定常状態の座標波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ は対称あるいは反対称のどちらかでなければならないということができた．一般の任意の数の粒子からなる系の場合には，シュレーディンガー方程式の解（座標波動関数）は，任意の粒子対の互換に関して，（スピン因子を含む）全波動関数のように自動的には，対称あるいは反対称にかならずしもなってくれない．このことは，2粒子の座標だけを互換してもそれら粒子の物理的互換には対応しないことと関連している．粒子の物理的同等性から導かれるのは，系のハミルトニアンが粒子の互換に関して不変であること，したがってもしもある関数がシュレーディンガー方程式の解であるならば，その関数から変数のいろいろな置換によって得られる関数もまたその解であることだけである．

はじめに置換に関して一般的ないくつかの注意を述べておこう．N 個の粒子からなる系では，全部で $N!$ 個の異なる置換が可能である．もしもすべての粒子に番号をつけて考えると，各置換は数 $1,2,3,\cdots$ の一定の数列によってあらわされる．このような各数列は，自然数列 $1,2,3,\cdots$ から粒子の対を遂次互換

1) このような方法は，多数の粒子の系に対して同様の計算を行なう場合にとくに有用である．

することによって得られる．置換は偶数回の互換によって得られるか奇数回の互換によって得られるかによって**偶置換**または**奇置換**と呼ばれる．N個の粒子の置換演算子を$\hat{P}$によってあらわし，また$\hat{P}$が偶置換ならば$+1$であり，また奇置換ならば-1となる量δ_Pを導入しよう．もしもφが全粒子に関して対称な関数であれば

$$\hat{P}\varphi=\varphi$$

となり，またもしも全粒子に関して反対称な関数であれば

$$\hat{P}\varphi=\delta_P\varphi$$

となる．

任意の関数$\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$から**対称化**の操作によって対称な関数をつくることができる：

$$\varphi_{\text{sym}}=\text{const}\sum_P \hat{P}\varphi. \tag{63.1}$$

ここで和はすべての可能な置換に関して行われる．反対称関数のつくり方は次のように書くことができる（この操作は**交代化**と呼ばれることもある）：

$$\varphi_{\text{ant}}=\text{const}\sum_P \delta_P\hat{P}\varphi. \tag{63.2}$$

同種粒子からなる系の波動関数の置換に関する振舞いの問題に戻ろう[1]．系のハミルトニアン$\hat{H}$がすべての粒子に関して対称であるという事実は，数学的には$\hat{H}$がすべての置換演算子$\hat{P}$と可換であることを意味する．しかしこれらの置換演算子は互いに可換ではないので，同時に対角化することはできない．このことは，すべての異なる対の互換に関して対称あるいは反対称であるようには，各波動関数φを選ぶことができないことを意味している[2]．

N個の変数の関数$\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$（またはいくつかのこれらの関数からなる組）の変数の置換に関する可能な対称性の型を決定する問題を考えよう．この

1）数学的に見れば，この問題は置換群の既約表現を求めることである．置換群の数学的理論の詳細は次の本を参照のこと：

H. Weyl, *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*, Methuen, London 1931;

M. Hamermesh, *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Pergamon, London, 1962;

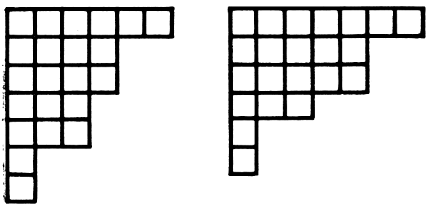
I. G. Kaplan, *Symmetry of Many-Electron Systems*, Academic Press, New York, 1974.

2）2粒子からなる系の場合にのみ，置換演算子が一つだけ存在し，それはハミルトニアンと同時に対角化できる．

対称性はそれ以上進まないものでなければならない．つまり，いくらそれ以上の対称または交代操作をその関数に施しても，自分自身の線形結合に変わるか，あるいは恒等的にゼロとなるようになっていなければならない．

われわれはすでに最大の対称性を関数に与える二つの演算を知っている：それはすべての変数に関する対称化とすべての変数に関する交代化である．これらの演算は次のように一般化できる．

全部で N 個の変数 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N$（または同じことであるが添字 $1, 2, 3, \cdots, N$）の組を $N_1, N_2, \cdots$ 個の要素（変数）を含むいくつかの数列に分割する．すなわち $N_1+N_2+\cdots=N$ である．このような分割は（**ヤングの図**と呼ばれる）図式によって直観的にあらわすことができる．この図では数 $N_1, N_2, \cdots$ はそれぞれいくつかの細胞からなる行によってあらわされる．（たとえば第21図は $N=22$ のときの $6+4+4+3+3+1+1$ および $7+5+5+3+1+1$ なる分割の図式をあらわしている）．それぞれの四角形には，数 $1, 2, 3, \cdots$ のうちの一つを入れることになる．もしも（第21図で行なっているように）行をその長さの順序に並べると，この図は水平方向の行だけでなく垂直方向の列も長さの順に並ぶことになる．



第 21 図

任意の関数 $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ をそれぞれの行に含まれる変数に関して対称化しよう．そのあとでは交代化の操作は異なる行に属する変数に関してだけ行なうことができる；同じ行に属する変数の対に関する交代化は明らかに恒等的にゼロを与えるからである．

各行から一つずつ変数を選ぶ場合には，それがその行の最初の細胞の中にあると考えても一般性を失うことはない（対称化したあとでは，各行の細胞内の変数の配列の順序は重要でない）．これらの変数に関して交代化しよう．次に最初の列を消し，このようにして短縮された図の各行から一つずつ選ばれた変数に関して交代化を行なおう．この場合これらの変数はふたたび短縮された行の最初の細胞の中にあると考えることができる．この過程を続けると，われわれはまず各行の変数に関して対称化され，次に各列の変数に関して交代化され

た関数に到達する（もちろん，交代化のあとでは，一般に関数は各行の変数に関して対称ではなくなる．保存されるのは他の行よりも突出している最初の行の細胞の中にある変数の間の対称性だけである）．

ヤングの図の各行へいろいろな方法で N 個の変数を分配することによって（各行の細胞への分配は重要でない），変数の任意の置換によって相互に変換する一連の関数を得る[1]．しかしこれらの関数のすべてが1次独立ではないことは強調しておく必要がある．独立な関数の数は，一般にヤングの図の行への変数の可能な分配の数よりも少ないからである．この問題に関してこれ以上詳しく論ずるのはやめよう[2]．

こうして各ヤングの図によって，置換に関する関数の対称性の型が決まる．（N を与えたときに）可能なすべてのヤングの図をつくると，すべての可能な対称性の型が得られる．これは数 N をすべての可能な方法でいくつかの小さい成分の和に分割することに帰着する．この可能な分割の中には数 N 自身も含まれる（したがって $N=4$ に対する可能な分割は，$4, 3+1, 2+2, 2+1+1, 1+1+1+1$ である）．

系の各エネルギー準位には，それに属するシュレーディンガー方程式の解のもつ置換対称性を決定するヤングの図を対応させることができる．この場合エネルギーの各値には，置換によって相互に変換するいくつかの異なる関数が一般に対応する．この《置換縮退》の存在は，演算子 $\hat{P}$ が，すでに述べたようにそれぞれハミルトニアンと可換であるが，互いには可換でないということと関連している（§10，35頁）．しかしこのことはエネルギー準位になんらかの余分の物理的な縮退が存在することを意味するものではないことを強調しておこう．これらの異なる座標波動関数はすべて，スピン関数を掛けられてから，（粒子のスピンに依存する）対称性あるいは反対称性の条件を満たす定まった一つの結合——全波動関数——の中に組み入れられる．

---

1) 対称化と交代化を逆の順序で行なうこともできる．つまり最初に各列の変数に関して交代化し，そのあとで行の変数に関して対称化することもできる．しかしこれは何も新しいことを与えない．なぜならば，この二つの方法で得られた関数は互いに他方の線形結合となるからである．

2) 互いに変換される独立な関数は，置換群の既約表現の基底をなしている．これらの関数の数は表現の次元数である．スピン 1/2 をもつ粒子の場合におけるこの数は，本節の問題1で決定される．

（Nを与えたとき）対称性のいろいろな型の中には，ただ1個の関数が対応する型が必ず二つ存在する．その一つはすべての変数に関して対称な関数であり，他の一つは反対称な関数である（第一の場合にはヤングの図はN個の細胞でできた1行だけからなり，第二の場合には1列だけからなる）．

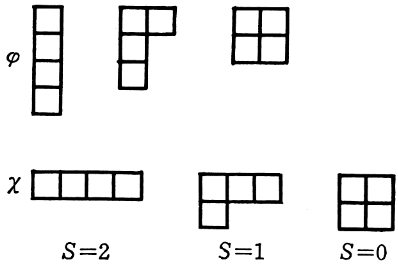
さて次にスピン波動関数$\chi(\sigma_1, \sigma_2, \cdots \sigma_N)$の話に移ろう．粒子の置換に関するスピン波動関数の対称性の型は同じヤングの図によって決定される．その場合変数の役目をするのは粒子のスピン投影である．ここで座標関数のヤングの図を与えたとき，スピン関数にはどのような図を対応させるべきかという問題が生ずる．まず粒子は整数のスピンをもつと仮定しよう．すると全波動関数ψは全粒子に関して対称でなければならない．このためにはスピン関数および座標関数の対称性は同一のヤングの図によって決定されなければならない．そして全波動関数ψは，この二つの関数の一定の双1次結合の形にあらわされる．われわれはここでこの結合を組立てる問題にはこれ以上立ち入らないことにしよう．

次に粒子は半整数のスピンをもつと仮定しよう．すると全波動関数は全粒子に関して反対称でなければならない．このためには座標関数およびスピン関数のヤングの図は双対的でなければならないことを示すことができる．すなわち行を列で，あるいは逆に列を行で置きかえることによって一方から他方が得られる（たとえば第21図に示す二つの図はこのような例である）．

重要なスピン1/2の粒子（たとえば電子）の場合をもっと詳しく考察しよう．ここでは各スピン変数$\sigma_1, \sigma_2, \cdots$は全部で二つの値$\pm 1/2$をとる．ある2変数に関して反対称な関数はこれらの変数が同じ値をとるとゼロとなるので，関数χは変数の対についてだけ交代化できることは明らかである．3変数についての交代化では，そのうちの2個は必ず同じ値をとるだろう．したがって恒等的にゼロになってしまう．

したがって電子系ではスピン関数のヤングの図は長さが1ないし2個の細胞の列しか含むことができない（すなわち全部で1ないし2行となる）．座標関数のヤングの図の方では，行の長さについて同じことが成り立つ．したがってN電子系に対して許される置換対称性の型の数は，数Nを数1と数2の和に分解する方法の数に等しいことになる．Nが偶数のときはこの数は$N/2+1$であり

（2が0, 1, …, $N/2$ 個ある分解），また N が奇数のときは $(N+1)/2$ である（2が0, 1, …, $(N-1)/2$ 個ある分解）．たとえば $N=4$ に対して許される（座標関数およびスピン関数の）ヤングの図を示すと第22図のようになる．



第 22 図

容易にわかるように，これらの対称性の型（すなわちヤングの図）はそれぞれ電子系の一定の全スピン S に対応している．スピン関数をスピノールの形すなわち N 階のスピノール $\chi^{\lambda\mu\cdots}$ の形で考察しよう．このときその添字（それはそれぞれ個別粒子のスピンに対応する）は，ヤングの図の細胞に分配される変数となる．N_1 および N_2 個ずつ細胞のある2行からなるスピンのヤングの図を考察しよう$(N_1+N_2=N,\ N_1\geq N_2)$．最初の N_2 列は2つずつ細胞をもち，対応する添字の対に関してスピノールは反対称でなければならない．第1行の残りの $n=N_1-N_2$ 個の細胞に入る添字に関しては，スピノールは対称でなければならない．ところがすでに知っているように，このような N 階のスピノールは，全スピン $S=n/2$ に対応する n 階の対称テンソンに還元される．座標関数のヤングの図に戻れば，ただ一つの細胞を含む n 個の行をもつ図は，全スピン $S=n/2$ の状態に対応するということができる．当然のことだが，N が偶数のときは全スピンは0から $N/2$ までの整数値をとることができるが，N が奇数のときは1/2から $N/2$ までの半整数値をとることができる．

このようなヤングの図と全スピンとの間の一意的な対応関係はスピン1/2をもつ粒子系についてのみ成り立つことを強調しておこう．すでに前節でも全部で2個の粒子からなる系についてこのことを確かめておいた．スピン s をもつ N 粒子の系に対してスピン波動関数は N 個の $2s$ 階対称スピノールの積，すなわち $2Ns$ 階スピノールであらわされる．もしもこのスピノールを N 個の細胞からなる一定のヤングの図に合わせて対称化するならば，このような対称化されたスピノールの独立な成分から，系の全スピン S の異なる各値に対応する線形結合の組をふつう何個か作ることができる．

スピン1/2をもつ粒子に対してスピン関数のヤングの図が2個以上の細胞の列を含むことができないのと同じように，任意のスピン s をもつ粒子に対して，列の長さは $2s+1$ 個の細胞を越えることができない．

もしも系の粒子数 N が $2s+1$ の整数倍であるとき，可能なヤングの図の中には長方形で，そのすべての列には $2s+1$ 個の細胞が含まれている図がある．この図には，全スピンが $S=0$ という一つの確定値が対応している．このことから，一般にあらゆる二つの（スピンに関する）ヤングの図で，両者を合成すると高さ $2s+1$ をもつ長方形になるようなものは，同一の値 S に対応していると結論される[1]．この結論は，二つの角運動量を合成するとき，和の角運動量がゼロとなるのは，各々の角運動量の大きさが等しいときにしか起こらないという事実の帰結である．

本節の最後に，すでに前に注意した事情（71頁の脚注参照）に戻ろう．すなわち，いくつかの同種粒子からなる系では，最低エネルギーをもつ定常状態の波動関数でも節をもたないとは必ずしもいえない．いまや，ここまでくれば，われわれはこの注意を精密化し，その理由も明らかにすることができる．

節をもたない波動関数（座標関数のこと）は必然的にすべての粒子に関して対称でなければならない．もしもその関数が任意の1対の粒子1, 2の置換に関して反対称であれば，$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}_2$ においてその関数はゼロとなるからである．ところがもしも系が三つまたはそれより多い電子からなっていれば，完全に対称な座標波動関数は一般に許されない（座標関数のヤングの図は2個より多い細胞からなる行をもつことができない）．したがってシュレーディンガー方程式の最低固有値に対応する解が（変分法の定理により）節をもたないとしても，この解は物理的に許されないことがわかる．この場合には系の基底状態には，シュレーディンガー方程式の最低でない固有値が対応し，またこの状態の波動関数は一般に節をもつ．一般に半整数スピン s をもつ粒子では，系の粒子が $2s+1$

1）このようなものは，例えば（$s=1$のとき）次のような二つの対の図である．



実線と点線で描かれた図は互いに相補的である．

個より多くなるとこのような状況が起こる．これに反し，ボゾンからなる系では完全に対称な座標波動関数がいつも可能である．

問　題

1.　スピン1/2のN個の粒子からなる系について，全スピンSがいろいろな値をとる場合の異なるエネルギー準位の数を求めよ．

解　系の全スピンの投影の与えられた値$M_S=\sum\sigma$は

$$f(M_S)=\frac{N!}{\left(\frac{N}{2}+M_S\right)!\left(\frac{N}{2}-M_S\right)!}$$

とおりの方法で実現することができる．($N/2+M_S$個の粒子には$\sigma=1/2$をつけ，残りには$\sigma=-1/2$をつければよい)．Sの値を与えられた各エネルギー準位には，スピン投影の値が$M_S=S, S-1, \cdots, -S$である$2S+1$個の状態が対応する．したがってSの値が与えられた異なるエネルギー準位の数は

$$n(S)=f(S)-f(S+1)=\frac{N!(2S+1)}{\left(\frac{N}{2}+S+1\right)!\left(\frac{N}{2}-S\right)!}$$

であることが容易にわかる．異なるエネルギー準位の総数$n=\sum_S n(S)$は，偶数のNに対して

$$n=f(0)=\frac{N!}{\left(\frac{N}{2}!\right)^2}$$

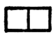
となり，奇数のNに対して

$$n=f\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{N!}{\left(\frac{N+1}{2}\right)!\left(\frac{N-1}{2}\right)!}$$

となる．

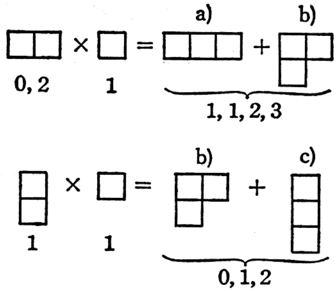
2.　スピン1をもつ2,3または4個の粒子から成る系のスピン関数が，異なる対称性の型をとるときに，生ずる全スピンSの値を求めよ．

解　2粒子に対しては次のような対応が確立している．粒子の置換の際にスピン関数に掛けられる因子は$(-1)^{2s-S}$でなければならない（§62の終りを見よ）．これから，スピン$s=1$をもつ粒子に対しては次の対応が得られる．

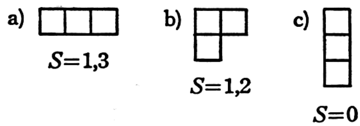
a) 　　b) 　　(1)

$S=0, 2$　　$S=1$

3粒子に対するヤングの図は，(1)の図に一つの細胞をあらゆる可能な方法でつけ加えることによって得られる．このことは次のような記号的な等式の形に書くことができる．

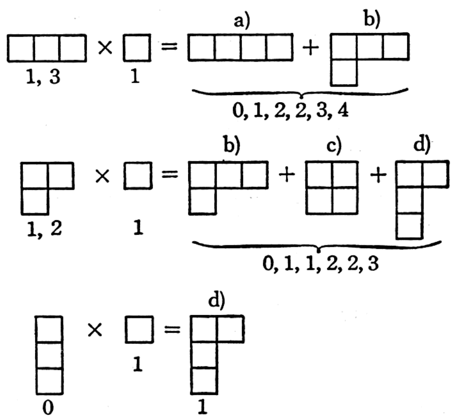


各図の下に値 S が示されている．３粒子の系の全スピンの値（右辺の図）は２粒子および１粒子の系のスピン（左辺の図）から角運動量の合成則に従って得られる[1]．右辺の個々の図の間で得られた値 S をどのように分配するかは，次の点に注意してきめられる．すなわち，図 c)（三つの細胞から成る列）は $S=0$ に対応する，したがって図 b)は（第２の等式で）残りの値１および２に対応する．すると，図 a) には（第１の等式で）b) を除いた残りの値１および３が対応する．結局：



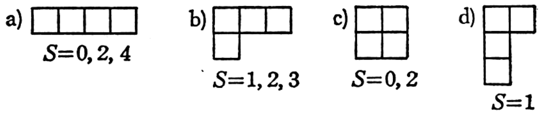
(2)

４粒子の系に対するヤングの図は，（列は３個より多い細胞を含まない条件の下で）図 (2) に一つの細胞をつけ加えることによって得られる：



1）右辺の図の下に１が２度あらわれているのは，角運動量のこの値が一度は角運動量０と１の合成から，もう一度は角運動量２と１の合成から生ずるためである．

図 c) は (1) の図 a) と合成すると，3個の細胞から成る列をもつ長方形になる．したがってそれは (1) の図 a) と同じ値 $S=0, 2$ に対応する．図 b) に対する値 S は第2の等式の中の残りから決定され，つぎに図 a) に対する値 S は第1の等式の中の残りから決定される：



(3)

§ 64. 第2量子化．ボーズ統計の場合

多数の同種粒子からなる系の理論においては，**第2量子化**の名で知られている特別の研究方法が広く用いられている．この方法は，粒子の数それ自身が変数である系をとり扱うことを余儀なくされる相対論的理論ではとくに不可欠である[1]．

$\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \cdots$ を1粒子の定常状態の波動関数の規格直交完全系であるとしよう[2]．これらの関数は，任意に選ばれたある外場の中の粒子の状態であってもよいが，ふつうは単に，確定した運動量（とスピン投影）をもつ自由粒子の波動関数である平面波が選ばれる．この場合状態のスペクトルを離散的にするために，大きいが有限の空間領域にある粒子の運動を考察しよう．有限の体積の中の運動では運動量成分の固有値は離散的な値をとる（そして隣接する固有値の間の間隔は領域の1次元的な大きさに逆比例し，大きさが増大するとゼロに収束する）．

自由粒子の系では，粒子の運動量は個々に保存される．このことにより，状態の**占有数**も保存される．占有数 $N_1, N_2, \cdots$ は状態 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ の各々に見出される粒子の数を表わしている．相互作用している粒子の系では，各粒子の運動量はもはや保存されず，したがって占有数も保存されない．このような系に対しては，占有数のいろいろな値の確率分布についてのみ論ずることができる．

---

1) 第2量子化の方法は，ディラックにより放射理論への応用の中で光子（フォトン）について展開され (1927)，その後ウィグナーとヨルダン (E. Wigner, P. Jordan, 1928) によりフェルミ粒子に対して拡張された．

2) § 61 におけると同様に，ξ は粒子の座標とスピンの投影 σ の組をあらわす．ξ についての積分と書けば，座標に関する積分ならびに σ に関する和のことであると了解する．

(粒子の座標およびスピン投影ではなくて) 占有数そのものが独立変数の役割を果たすような数学的枠組を作ることを試みよう．

このような枠組では，系の状態はいわば《占有数の空間における》波動関数で記述される．それらを (ふつうの座標の波動関数 $\Psi(\xi_1, \xi_2, \cdots; t)$ との区別を強調するために) $\Phi(N_1, N_2, \cdots; t)$ と書くことにしよう．絶対値の自乗 $|\Phi|^2$ は数 $N_1, N_2, \cdots$ のいろいろな値の確率を与える．

独立変数のこのような選び方に相応して，いろいろな物理量の演算子 (その中には系のハミルトニアンも含まれる) もまた占有数の関数に対するそれの作用という言葉で定式化されなければならない．このような定式化は，演算子のふつうの行列表示から出発して到達することができる．この場合考えるべき演算子の行列要素は，相互作用していない粒子の系の定常状態の波動関数に関するものである．これらの状態は占有数の確定値を与えることによって記述されるので，これによって，これらの変数に対する演算子の作用の性格が明らかになる．

まずはじめにボーズ統計にしたがう粒子の系を考察しよう．

$\hat{f}_a^{(1)}$ を a 番目の粒子に関するある量の演算子としよう．すなわちそれは変数 ξ_a の関数にだけ作用する．すべての粒子に関して対称な演算子

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_a \hat{f}_a^{(1)} \qquad (64.1)$$

を導入しよう (和はすべての粒子についてとる)．そして波動関数 (61.3) に関するこの演算子の行列要素を定義しよう．まず最初に行列要素がゼロとならないのは，数 $N_1, N_2, \cdots$ が変化しない遷移 (対角要素) およびこれらの数のうちの一つが1だけ増加し他の一つが1だけ減少する遷移の場合だけであることが容易にわかる．実際，各演算子 $\hat{f}_a^{(1)}$ は積 $\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\cdots\psi_{p_N}(\xi_N)$ のうちの一つの関数だけに作用するので，その行列要素は1個の粒子の状態の変化をともなう遷移に対してのみゼロでないことになる．しかしこれはある状態にある粒子が一つだけ減り，それにともなって他の状態にある粒子数が一つだけ増えることを意味している．これらの行列要素の計算は実は非常に簡単である；その説明を追うよりも，自分でやってみるほうがずっと容易である．したがってわれわれは計算結果のみを記すことにする．非対角要素は

$$\langle N_i, N_k-1|F^{(1)}|N_i-1, N_k\rangle = f_{ik}^{(1)}\sqrt{N_i N_k} \tag{64.2}$$

に等しい．われわれは行列要素が対角にならない添字のみを示して，他は簡単のために省略する．ここで $f_{ik}^{(1)}$ は行列要素

$$f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(\xi)\hat{f}^{(1)}\psi_k(\xi)d\xi \tag{64.3}$$

である．演算子 $\hat{f}_a^{(1)}$ はそれが作用する変数の記号だけで区別されるので積分 (64.3) は添字 a に依存しない．それでこの添字は省略された．$F^{(1)}$ の対角行列要素は状態 $\Psi_{N_1N_2\cdots}$ における量 $F^{(1)}$ の平均値である．計算の結果

$$\overline{F^{(1)}} = \sum_i f_{ii}^{(1)} N_i \tag{64.4}$$

となる．ここで第2量子化の方法において基本的な演算子 $\hat{a}_i$ を導入しよう．それは座標の関数に作用するのではなく占有数の関数に作用する演算子である．定義により，演算子 $\hat{a}_i$ は関数 $\Phi(N_1, N_2, \cdots)$ に作用させると，変数 N_i の値を1だけ減少させ，それと同時に波動関数に $\sqrt{N_i}$ を掛ける．すなわち

$$\hat{a}_i\Phi(N_1, N_2, \cdots, N_i, \cdots) = \sqrt{N_i}\Phi(N_1, N_2, \cdots, N_i-1, \cdots) \tag{64.5}$$

である．演算子 $\hat{a}_i$ は i 番目の状態にある粒子の数を一つだけ減少させるということができる．したがってそれは粒子の**消滅演算子**と呼ばれる．それは行列の形にあらわすことができて，そのゼロでない唯一の要素は

$$\langle N_i-1|a_i|N_i\rangle = \sqrt{N_i} \tag{64.6}$$

である．$\hat{a}_i$ に共役な演算子 $\hat{a}_i^+$ は，定義により（(11.9) 参照）ゼロでない唯一の行列要素

$$\langle N_i|a_i^+|N_i-1\rangle = \langle N_i-1|a_i|N_i\rangle^* = \sqrt{N_i} \tag{64.7}$$

をもつ行列としてあらわされる．これは関数 $\Phi(N_1, N_2, \cdots)$ に作用すると数 N_i を1だけ増加させることを意味する：

$$\hat{a}_i^+\Phi(N_1, N_2, \cdots, N_i, \cdots) = \sqrt{N_i+1}\Phi(N_1, N_2, \cdots, N_i+1, \cdots). \tag{64.8}$$

いいかえると，演算子 $\hat{a}_i^+$ は i 番目の状態にある粒子の数を1だけ増大させる．したがってそれは粒子の**生成演算子**と呼ばれる．

演算子の積 $\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ を波動関数に作用させると，明らかにそれに定数が掛かるだけで，すべての変数 $N_1, N_2, \cdots$ は変化しない．すなわち演算子 $\hat{a}_i$ は N_i を1だけ減少させるが，そのあとで $\hat{a}_i^+$ がそれをもとの値に戻す．行列 (64.6) および (64.7) を直接掛けると実際にわかるように，$\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ は N_i なる対角要素をも

つ対角行列としてあらわされる．それは

$$\hat{a}_i^+\hat{a}_i=N_i \tag{64.9}$$

と書くことができる．同様にして

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^+=N_i+1 \tag{64.10}$$

がえられる．上の2式の差をとると演算子 $\hat{a}_i$ と $\hat{a}_i^+$ のあいだの交換則が得られる：

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^+-\hat{a}_i^+\hat{a}_i=1. \tag{64.11}$$

異なる i と k のついた演算子は，異なる変数（N_i と N_k）に作用するので，交換する：

$$\hat{a}_i\hat{a}_k-\hat{a}_k\hat{a}_i=0, \qquad \hat{a}_i\hat{a}_k^+-\hat{a}_k^+\hat{a}_i=0 \quad (i\neq k). \tag{64.12}$$

演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ の上述の性質から，演算子

$$\hat{F}^{(1)}=\sum_{i,k} f_{ik}^{(1)}\hat{a}_i^+\hat{a}_k \tag{64.13}$$

は演算子（64.1）と同じであることが容易にわかる．実際，(64.6), (64.7) を用いて計算されるすべての行列要素は，行列要素（64.2), (64.4）と一致する．この結果は非常に重要である．式（64.13）では量 $f_{ik}^{(1)}$ は単なる数である．したがってわれわれは座標関数に作用するふつうの演算子を，新しい変数である占有数 N_i の関数に作用する演算子の形にあらわすことに成功したことになる．

得られた結果は別の形の演算子にも容易に一般化される．いま

$$\hat{F}^{(2)}=\sum_{a>b}\hat{f}_{ab}^{(2)} \tag{64.14}$$

とする．ここで $\hat{f}_{ab}^{(2)}$ は粒子の対の双方に直接関係した物理量の演算子である．したがって ξ_a と ξ_b の関数に作用する．同様の計算を行なうと，このような演算子は演算子 $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ を用いて次のようにあらわすことができることがわかる：

$$\hat{F}^{(2)}=\frac{1}{2}\sum_{i,k,l,m}\langle ik|f^{(2)}|lm\rangle\hat{a}_i^+\hat{a}_k^+\hat{a}_m\hat{a}_l \tag{64.15}$$

ここで

$$\langle ik|f^{(2)}|lm\rangle=\iint\psi_i^*(\xi_1)\psi_k^*(\xi_2)\hat{f}^{(2)}\psi_l(\xi_1)\psi_m(\xi_2)d\xi_1d\xi_2$$

である．これらの式をすべての粒子に関して対称な任意の他の形の演算子（$\hat{F}^{(3)}=\sum\hat{f}_{abc}^{(3)}$ など）に一般化することは自明である．

これらの公式を使うと，われわれの研究の対象である相互作用している N 個

の同種粒子からなる物理系のハミルトニアンを，演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ を用いてあらわすことができる．このような系のハミルトニアンはもちろんすべての粒子に関して対称である．非相対論的近似[1] ではハミルトニアンは粒子のスピンに依存せず，次のように一般的な形にあらわすことができる：

$$\hat{H}=\sum_a \hat{H}_a^{(1)}+\sum_{a>b} U^{(2)}(\boldsymbol{r}_a, \boldsymbol{r}_b)+\sum_{a>b>c} U^{(3)}(\boldsymbol{r}_a, \boldsymbol{r}_b, \boldsymbol{r}_c)+\cdots. \quad (64.16)$$

ここで $\hat{H}_a^{(1)}$ は一つの（a 番目の）粒子の座標のみに依存するハミルトニアンの部分

$$\hat{H}_a^{(1)}=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_a+U^{(1)}(\boldsymbol{r}_a) \quad (64.17)$$

である．ここで $U^{(1)}(\boldsymbol{r}_a)$ は外場の中の1粒子のポテンシャル・エネルギーである．(64.16) の残りの項は粒子のあいだの相互作用エネルギーに対応する．ここでそれぞれ2粒子，3粒子などの座標に依存する項を別々に書いている．

このような形にハミルトニアンをあらわすと，ただちに式 (64.13), (64.15) およびこれに類似の式を適用することができる．そうして

$$\hat{H}=\sum_{i,k} H_{ik}^{(1)}\hat{a}_i^+\hat{a}_k+\frac{1}{2}\sum_{i,k,l,m}\langle ik|U^{(2)}|lm\rangle\hat{a}_i^+\hat{a}_k^+\hat{a}_m\hat{a}_l+\cdots \quad (64.18)$$

となる．これによって占有数の関数に作用する演算子の形をしたハミルトニアンの求める表式が得られた．

相互作用していない粒子の系に対しては，式 (64.18) のうち第1項のみが残る：

$$\hat{H}=\sum_{i,k} H_{ik}^{(1)}\hat{a}_i^+\hat{a}_k. \quad (64.19)$$

もしも関数 ψ_i として，個別粒子のハミルトニアン $H^{(1)}$ の固有関数を選ぶと，行列 $H_{ik}^{(1)}$ は対角になり，その対角要素は粒子のエネルギー固有値 ε_i である．したがって

$$\hat{H}=\sum_i \varepsilon_i\hat{a}_i^+\hat{a}_i$$

となる．演算子 $\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ をその固有値 (64.9) で置きかえると，系のエネルギー準位をあらわす式

$$E=\sum_i \varepsilon_i N_i$$

---

1) 磁場が存在しない場合．

を得る．これは当然得られるべきあたりまえの結果である．

ここで展開された方法は，いわゆる **ψ-演算子**

$$\hat{\psi}(\xi)=\sum_i \psi_i(\xi)\hat{a}_i, \qquad \hat{\psi}^+(\xi)=\sum_i \hat{\psi}_i^*(\xi)\hat{a}_i^+ \tag{64.20}$$

を導入すると，さらに簡潔な形にあらわすことができる[1]．ここで変数 ξ はパラメーターと考える．演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ に関して上に述べたことから明らかなように，演算子 $\hat{\psi}$ は系の粒子の総数を一つだけ減少させ，$\hat{\psi}^+$ は一つだけ増加させる．

容易にわかるように，演算子 $\hat{\psi}^+(\xi_0)$ は点 ξ_0 に位置する粒子を生成する．実際，演算子 $\hat{a}_i^+$ の作用によって，波動関数 $\psi_i(\xi)$ の状態にある粒子がつくられる．このため，演算子 $\hat{\psi}^+(\xi_0)$ の作用の結果は，波動関数

$$\sum_i \psi_i^*(\xi_0)\psi_i(\xi)=\delta(\xi-\xi_0)$$

をもつ状態に粒子がつくられる（公式（5.12）を用いた）．これは座標（とスピン）の確定値をもつ粒子に対応している[2]．

ψ-演算子に対する交換則は，演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ に対する交換則から直接導かれ，

$$\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}(\xi')-\hat{\psi}(\xi')\hat{\psi}(\xi)=0, \tag{64.21}$$

$$\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}^+(\xi')-\hat{\psi}^+(\xi')\hat{\psi}(\xi)=\sum_i \psi_i(\xi)\psi_i^*(\xi')=\delta(\xi-\xi') \tag{64.22}$$

となる．

第2量子化演算子 $\hat{F}^{(1)}$ は，ψ-演算子を用いて次の形に書くことができる：

$$\hat{F}^{(1)}=\int\hat{\psi}^+(\xi)\hat{f}^{(1)}\hat{\psi}(\xi)d\xi. \tag{64.23}$$

（ここで演算子 $\hat{f}^{(1)}$ は $\hat{\psi}(\xi)$ の中のパラメーター ξ の関数に作用するものとする）．実際これに（64.20）の形の $\hat{\psi}$ と $\hat{\psi}^+$ を代入し，定義（64.3）に注意すると，式（64.13）にもどる．同様にして（64.15）の代りに

$$\hat{F}^{(2)}=\frac{1}{2}\iint\hat{\psi}^+(\xi)\hat{\psi}^+(\xi')\hat{f}^{(2)}\hat{\psi}(\xi')\hat{\psi}(\xi)d\xi d\xi' \tag{64.24}$$

がえられる．

1）式（64.20）と，ある完全関数系による任意の波動関数の展開式 $\psi=\sum a_i\psi_i$ との間の類似性に注意せよ．ここで波動関数は改めてもう一度量子化されている．そのゆえにこの方法が第2量子化と呼ばれるのである．

2）$\delta(\xi-\xi_0)$ は便宜上，積

$$\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)\delta_{\sigma\sigma_0}$$

をあらわす．

とくに系のハミルトニアンは ψ-演算子を用いてあらわすと，次の形に書かれる：

$$\hat{H}=\int\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\psi}^+(\xi)\triangle\hat{\psi}(\xi)+\hat{\psi}^+(\xi)U^{(1)}(\xi)\hat{\psi}(\xi)\right\}d\xi$$

$$+\frac{1}{2}\iint\hat{\psi}^+(\xi)\hat{\psi}^+(\xi')U^{(2)}(\xi,\xi')\hat{\psi}(\xi')\hat{\psi}(\xi)d\xi d\xi'+\cdots. \quad (64.25)$$

波動関数 ψ の状態にある粒子の確率密度を定義する積 $\psi^*\psi$ と同様にして，ψ-演算子から作られる演算子 $\hat{\psi}^+(\xi)\hat{\psi}(\xi)$ は粒子の**密度演算子**と呼ばれる．積分

$$\hat{N}=\int\hat{\psi}^+\hat{\psi}d\xi \quad (64.26)$$

は第 2 量子化の方法において，系に含まれる粒子の総数の演算子の役を果たしている．実際にこの式に (64.20) の形の ψ-演算子を代入し，波動関数の規格性と相互直交性を考慮すると，$\hat{N}=\sum\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ を得る．この和の各項は，i 番目の状態にある粒子数の演算子であり，(64.9) によれば，その固有値は占有数 N_i に等しい．そしてこれらのすべての数の和は系の全粒子数である[1]．

最後にもしも系がいろいろな種類のボゾンからなる場合には，第 2 量子化の方法の中に，粒子の種類毎に固有の演算子 $\hat{a}, \hat{a}^+$ を導入しなければならないことに注意しよう．この場合，異なる種類の粒子に属する演算子はもちろん互いに可換である．

§ 65. 第 2 量子化．フェルミ統計の場合

第 2 量子化の方法のすべての主要な側面は，同種のフェルミオンからなる系にも変更なしにあてはまる．しかし諸量の行列要素と演算子 $\hat{a}_i$ をあらわす具体的な式はもちろん異なってくる．

今度は波動関数 $\Psi_{N_1N_2\cdots}$ は (61.5) の形をもつ．この関数の反対称性に関連して，まずはじめにその符号を選ぶ問題が生じる．ボーズ統計の場合にはこの問題は起こらない．なぜならば波動関数の対称性のために，一度選ばれるとその符号は粒子のあらゆる置換に対して保存されるからである．関数 (61.5) の

1) 一定の粒子数をもつ系に対しては，この命題は（自由粒子の系のハミルトニアン (64.19) の性質と同じく）あたりまえのことである．しかしながら，それを相対論的理論に一般化すると，あたりまえでない新しい結果がえられる（第Ⅳ巻『相対論的量子力学』§11 と比較）．

符号を確定するために，それを次のようにして定めることにする．すべての状態 ψ_i を一連番号によって後にも先にも一度だけ番号づけしよう．それ以後は行列式（61.5）の行を，いつも

$$p_1<p_2<p_3<\cdots<p_N \tag{65.1}$$

となるように埋めることにし，また列には異なる変数の関数を $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N$ なる順序に並べることにする．数 $p_1, p_2, \cdots$ のうちには同じものはありえない．なぜならば，もしも同じものがあれば行列式は0となるからである．いいかえると，占有数 N_i の値は0または1のどちらかしかとることができない．

ふたたび（64.1）の形をした演算子 $\hat{F}^{(1)}=\sum_a \hat{f}_a^{(1)}$ を考察しよう．§64と同じ理由からその行列要素のうちでゼロと異なるのは，すべての占有数が変わらない遷移，および占有数の一つ（N_i）が1だけ減少し（1から0になり），別の占有数（N_k）が1だけ増加する（0から1となる）遷移に対するものだけである．容易にわかるように，$i<k$ の場合には

$$\langle 1_i, 0_k|F^{(1)}|0_i, 1_k\rangle = f_{ik}^{(1)}(-1)^{\Sigma(i+1,k-1)} \tag{65.2}$$

となる．ここで $0_i, 1_i$ は $N_i=0, N_i=1$ なる値をあらわし，記号 $\sum(k,l)$ は k 番目から l 番目までのすべての状態の占有数の和

$$\sum(k,l)=\sum_{n=k}^{l} N_n$$

をあらわしている[1]．対角要素としては前に得た式（64.4）

$$\overline{F^{(1)}}=\sum_i f_{ii}^{(1)} N_i \tag{65.3}$$

が得られる．

演算子 $\hat{F}^{(1)}$ が式（64.13）の形にあらわされるためには，演算子 $\hat{a}_i$ は次のような要素をもつ行列として定義されなければならない：

$$\langle 0_i|a_i|1_i\rangle=\langle 1_i|a_i^+|0_i\rangle=(-1)^{\Sigma(1,i-1)}. \tag{65.4}$$

これらの行列の積をつくると（$k>i$ のとき）

$$\langle 1_i, 0_k|a_i^+ a_k|0_i, 1_k\rangle=\langle 1_i, 0_k|a_i^+|0_i, 0_k\rangle\langle 0_i, 0_k|a_k|0_i, 1_k\rangle$$
$$=(-1)^{\Sigma(1,i-1)}(-1)^{\Sigma(1,i-1)+\Sigma(i+1,k-1)},$$

あるいは

1）$i>k$ の場合には，（65.2）の指数の中で $\sum(k+1, i-1)$ と書く必要がある．$i=k\pm1$ の場合には，これらの和はゼロで置きかえなければならない．

$$\langle 1_i, 0_k | a_i^+ a_k | 0_i, 1_k \rangle = (-1)^{\Sigma(i+1, k-1)} \tag{65.5}$$

を得る．もしも $i=k$ ならば行列 $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ は対角的であり，その要素は $N_i=1$ のとき 1 であり，$N_i=0$ のときゼロである．これは次の形に書くことができる：

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = N_i. \tag{65.6}$$

これらの式を (64.13) に代入すると，実際 (65.2), (65.3) を得る．

$\hat{a}_i^+, \hat{a}_k$ を逆の順序で掛けると次のようになる：

$$\langle 1_i, 0_k | a_k a_i^+ | 0_i, 1_k \rangle = \langle 1_i, 0_k | a_k | 1_i, 1_k \rangle \langle 1_i, 1_k | a_i^+ | 0_i, 1_k \rangle$$
$$= (-1)^{\Sigma(1, i-1) + \Sigma(i+1, k-1) + \Sigma(1, i-1) + 1}$$

あるいは

$$\langle 1_i, 0_k | a_k a_i^+ | 0_i, 1_k \rangle = -(-1)^{\Sigma(i+1, k-1)}. \tag{65.7}$$

である．(65.7) を (65.5) と比較すると，これらの量は符号が互いに逆であることがわかる．すなわち

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i^+ = 0 \quad (i \neq k)$$

と書くことができる．対角要素 $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$ に対しては

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ = 1 - N_i \tag{65.8}$$

が得られる．これを (65.6) に加えると

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = 1$$

を得る．得られた二つの等式はまとめて次の形に書くことができる：

$$\hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = \delta_{ik}. \tag{65.9}$$

同様の計算を行なうと，任意の $\hat{a}_i, \hat{a}_k$ に対して次の関係式が得られる：

$$\hat{a}_i \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i = 0 \tag{65.10}$$

(とくに $\hat{a}_i \hat{a}_i = 0$ となる)．

このようにして，$i \neq k$ のとき演算子 $\hat{a}_i$ と $\hat{a}_k$（または $\hat{a}_k^+$）は互いに反可換であることがわかった．ところがボーズ統計の場合にはそれらは互いに可換であった．この差異はまったく自然である．ボーズ統計の場合には演算子 $\hat{a}_i$ と $\hat{a}_k$ は完全に独立であった．各演算子 $\hat{a}_i$ はただ一つの変数 N_i に作用するだけであり，したがって作用の結果は他の占有数の値に依存しなかった．ところがフェルミ統計の場合には，演算子 $\hat{a}_i$ の作用の結果はその数 N_i 自身に依存するだけでなく，定義 (65.4) から明らかなように，それより若い番号のすべての状態の占有数にも依存している．したがって異なる演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_k$ の作用は独立と考

えることはできない.

演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ の性質をこのように定義してしまうと，残りのすべての公式(64.13)-(64.18) は完全に有効である．また (64.20) により定義されたψ-演算子を用いて物理量の演算子をあらわした式 (64.23)-(64.25) もそのまま成り立つ．しかし交換則 (64.21), (64.22) の方は明らかに次式で置きかえられる：

$$\hat{\psi}^+(\xi')\hat{\psi}(\xi)+\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}^+(\xi')=\delta(\xi-\xi'), \qquad (65.11)$$

$$\hat{\psi}(\xi')\hat{\psi}(\xi)+\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}(\xi')=0. \qquad (65.12)$$

もしも系がいろいろな種類の粒子からできていれば，（すでに前節の終わりに指摘したように）粒子の種類毎にそれぞれ固有の第2量子化演算子を導入しなければならない．ボゾンおよびフェルミオンに属する演算子はこの場合互いに可換である．異なるフェルミオンに属する演算子についていえば，非相対論的極限ではそれらを形式的には可換であるとも反可換であるとも考えることができる．いずれの仮定に立っても第2量子化の方法を適用すると同じ結果が得られる.

しかし，将来異なる粒子の間の相互転換を許す相対論へ応用することを考えれば，異なるフェルミオンの生成および消滅演算子を反可換であると考えなければならない．この事情は，《異なる》粒子として同じ複合粒子の二つの異なる内部状態を考えれば自明であろう.

第10章　原　　子

§ 66. 原子のエネルギー準位

非相対論的近似では原子の定常状態は，原子核のクーロン場の中を運動しながら，互いに電気的に相互作用している電子の体系のシュレーディンガー方程式によって決定される．この方程式の中には電子スピン演算子はまったく含まれていない．よく知られているように，中心対称の外場の中の粒子系では，全軌道角運動量$\boldsymbol{L}$と状態の偶奇性が保存される．それゆえ原子の各定常状態は一定の角運動量の値Lとその偶奇性によって特徴づけられるであろう．さらに同種粒子の系の定常状態の座標波動関数は一定の置換対称性をもっている．§63で見たように，電子系では一定の型の置換対称性（すなわち一定のヤングの図）には，系の全スピンの一定の値が対応している．それゆえ原子の各定常状態は電子の全スピンSによっても特徴づけられるであろう．

一定のSとLの値をもつエネルギー準位は，空間の中でベクトル$\boldsymbol{S}$と$\boldsymbol{L}$がそれぞれいろいろの可能な方向をもちながら縮退している．$\boldsymbol{L}$と$\boldsymbol{S}$の方向に関する縮退度はそれぞれ$2L+1$および$2S+1$である．したがって一定のLとSをもつ準位の全縮退度は積$(2L+1)(2S+1)$に等しい．

しかし実際は，電子の電磁的相互作用の中にはそのスピンに依存する相対論的効果が存在する．このため原子のエネルギーはベクトル$\boldsymbol{L}$と$\boldsymbol{S}$の大きさに依存するだけでなく，その相互の配向にも依存することになる．厳密にいえば，相対論的相互作用をとり入れると，原子の軌道角運動量$\boldsymbol{L}$とスピン$\boldsymbol{S}$はもはや別々には保存されなくなる．保存されるのは全角運動量$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$だけである．全角運動量の保存は閉じた系における空間の等方性に直接に由来する厳密な法則である．その関係で，エネルギー準位は全角運動量の値Jによって指定されなければならない．

しかしもしも相対論的効果が比較的小さければ（多くの場合このようになっ

ている)，これを摂動としてとり入れることができる．この摂動の影響によって，与えられたLとSをもつ準位は，全角運動量Jの値の異なる一連の（互いに接近した）異なる準位に《分裂する》．

これらの（１次近似の）準位は適当な永年方程式（§39）によって決められる．またその（ゼロ次近似の）波動関数は与えられたLとSをもつはじめの縮退した準位の波動関数の一定の線形結合となる．

したがってこの近似では従来どおり軌道角運動量とスピンの絶対値は保存される（しかしそれらの方向は保存しない）と考えることができて，準位をLとSの値で指定することもできる．

こうして相対論的効果の結果，一定のLとSの値をもつ準位はJの値の異なる一連の準位に分裂する．このような分裂のことを準位の**微細構造**（あるいは**多重項分裂**）と呼ぶ．すでによく知っているように，Jは$L+S$から$|L-S|$までの値をとる．それゆえ一定のLとSをもつ準位は（$L>S$のとき）$2S+1$個あるいは（$L<S$のとき）$2L+1$個の異なる準位に分裂する．これらの各準位はベクトル$\boldsymbol{J}$の方向に関して縮退が残っている．この縮退度は$2J+1$に等しい．数$2J+1$をすべての可能なJの値について加えたものは当然$(2L+1)(2S+1)$に等しくなる．これは容易に確かめられる．

原子のエネルギー準位（あるいはいわゆる原子の**スペクトル項**）は，個別粒子が一定の角運動量をもつ状態を指定するために用いた記号（§32）と類似の記号で指定される．すなわち異なる全軌道角運動量の値Lをもつ状態は，次の対応関係にあるローマ大文字によって指定される：

$$\begin{array}{cccccccccccc} L=0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & \cdots \\ S & P & D & F & G & H & I & K & L & M & N & \cdots \end{array}$$

この記号の左肩にはスペクトル項の**多重度**と呼ばれる数$2S+1$を記入する（ただし，この数は$L\geqq S$の場合にのみ準位の微細構造の成分の数を与えることを知っておかなくてはならない[1]）．右下には全角運動量の値Jを記入する．したがって記号${}^2P_{1/2}$, ${}^2P_{3/2}$は$L=1, S=1/2$で全角運動量がそれぞれ$J=1/2, 3/2$の準位をあらわしている．

1)　$2S+1=1, 2, 3, \cdots$の場合をそれぞれ，1重 (singlet)，2重 (doublet)，および3重 (triplet) 項準位と呼ぶ．

§ 67. 原子内の電子状態

1個より多い電子をもつ原子は，原子核の場の中を運動しながら互いに相互作用している電子の複雑な系である．このような系では，厳密には全体としての系の状態しか考えることができない．それにもかかわらず原子内では個別の電子の状態という概念，すなわち原子核と残りのすべての電子によってつくられる中心対称なある有効場の中の電子の定常運動の状態という概念を，よい近似で導入することができる．この場は原子内の電子が異なれば一般には異なっている．そしてそれぞれが残りのすべての電子の状態に依存するので，これらはすべて同時に決められなければならない．このような場のことを**自己無撞着の場**と呼ぶ．

自己無撞着の場は中心対称であるから，各電子の状態はその軌道角運動量 l の確定値によって指定される．l が与えられると個別電子の状態は，値 $n=l+1, l+2, \cdots$ をとる**主量子数** n によって（そのエネルギーが増す順序に）番号づけされる．このような番号順は水素原子で採用されたものと一致するように選ばれている．しかしながら複雑な原子におけるいろいろな l をもつエネルギー準位の高くなる順序は，水素原子で見られるものと一般には異なっている．後者ではエネルギーは一般に l に依存しない．したがって大きい n をもつ状態が常に高いエネルギーをもっている．複雑な原子ではたとえば $n=5, l=0$ の準位が $n=4, l=2$ の準位よりも低い位置にあることが知られている（もっと詳しくは §73 参照）．

いろいろな n と l をもつ個別の電子の状態は，主量子数の値を示す数字と l の値をあらわす文字からなる記号によって指定するのがならわしである[1]．たとえば $4d$ は $n=4, l=2$ の状態を示す．原子の状態を完全に記述するためには，全 L, S, J の値を指定するとともに，すべての電子の状態を列挙する必要がある．たとえば記号 $1s2p\,{}^3P_0$ は $L=1, S=1, J=0$ で2つの電子が $1s$ と $2p$ 状態にあるヘリウム原子の状態を指定している．もしも幾つかの電子が同じ l と n の状態にあれば，これは簡単にベキ数の形に示すのがならわしである．たとえば $3p^2$ は $3p$ 状態にある2個の電子をあらわしている．原子内のいろいろな l, n

1） 主量子数 $n=1,2,3,\cdots$ をもつ電子を，それぞれ $K, L, M, \cdots$ 殻の電子と呼ぶ命名法も一般によく用いられている（§74 参照）．

をもつ状態への電子の分布のことを**電子配置**と呼んでいる．

n と l の値を与えても，電子は軌道角運動量の z 軸への投影（m）とスピンの z 軸への投影（σ）のいろいろな値をとり得る．l を与えたとき数 m は $2l+1$ 個の値をとるが，数 σ の方は 2 つの値 $\pm 1/2$ に限られている．したがって同じ n, l をもつ異なった状態は全部で $2(2l+1)$ 個ある．このような状態を**等価な状態**と呼んでいる．これらの状態にはパウリの原理に従って一つずつ電子が入る．したがって，原子内で同時に同じ n, l をもち得る電子の数は $2(2l+1)$ を越えることはない．一定の n, l をもつすべての状態を占有した電子の集団のことを，その型の**閉殻**と呼ぶ．

同じ電子配置ではあるが異なる L, S をもつ原子準位のエネルギーの差[1]は電子の静電的相互作用と関係している．通常このエネルギー差は比較的小さい——異なる電子配置をもつ準位間の開きの数分の 1 である．同じ電子配置をもつが L, S の異なる準位の間の位置関係については，次のような経験的に確立された**フントの規則**（F. Hund, 1925）がある：

与えられた電子配置において許される最大の S 値をもち，しかも（この S において許される）最大の L 値をもつ項が最低のエネルギーをもつ項である[2]．

与えられた電子配置に許される原子項をどうしたら見つけられるかを示すことにしよう．もしも電子が等価でなければ，可能な L, S の値の決定は角運動量の合成則に従って直接やればよい．たとえば配置 $np, n'p$（n と n' は異なる）の場合には，合成角運動量 L は 2, 1, 0 という値をとり，合成スピンは $S=0, 1$ である．これらを互いに組み合わせるとスペクトル項 ${}^{1,3}S, {}^{1,3}P, {}^{1,3}D$ が得られる．

等価な電子を扱う場合には，パウリの原理に基づく制限が生ずる．たとえば 3 個の等価な p 電子からなる配置を考えよう．$l=1$（p 状態）の場合には，軌道角運動量の投影 m は $m=1, 0, -1$ という値をとり得る．したがって，次のよ

---

1) 各多重項の微細構造のことはここでは考えない．

2) S が最大という要請には，次のような理由づけができる．例として 2 電子からなる系を考えよう．この場合には $S=0$ と $S=1$ があり得る．そして $S=1$ は反対称な座標波動関数 $\varphi(r_1, r_2)$ に対応している．この関数は $r_1=r_2$ においてゼロになる．換言すれば，$S=1$ の状態では二つの電子が互いに近くに来る確率は小さい．このためその静電反発力が比較的小さくなり，したがってエネルギーも低くなる．これと同じように数個の電子からなる系でも最大のスピンは，《もっとも反対称的な》座標波動関数に対応している．

うに数 m, σ が対となる 6 個の状態が可能である：

$$\begin{array}{llllll} \text{a)} & 1, \quad 1/2, & \text{b)} & 0, \quad 1/2, & \text{c)} & -1, \quad 1/2, \\ \text{a}') & 1, \quad -1/2, & \text{b}') & 0, \quad -1/2, & \text{c}') & -1, \quad -1/2. \end{array}$$

3 個の電子はこれらのうちの任意の三つの状態に一つずつ分布させることができる．その結果，次のような全軌道角運動量とスピンの投影値 $M_L=\sum m$, $M_S=\sum \sigma$ をもつ原子状態が得られる：

$$\begin{array}{lll} \text{a+a}'\text{+b)}\ \ 2,\ 1/2, & \text{a+a}'\text{+c)}\ \ 1,\ 1/2, & \text{a+b+c)}\ \ 0,\ 3/2, \\ & \text{a+b+b}')\ \ 1,\ 1/2, & \text{a+b+c}')\ \ 0,\ 1/2, \\ & & \text{a+b}'\text{+c)}\ \ 0,\ 1/2, \\ & & \text{a}'\text{+b+c)}\ \ 0,\ 1/2 \end{array}$$

(負の M_L, M_S 値をもつ状態はなにも新しいものを生まないので，ここには書く必要がない)．$M_L=2, M_S=1/2$ の状態の存在は ^2D 項がなければならないことを示している．またこの項には状態 $(1, 1/2)$ の一つと $(0, 1/2)$ の一つも対応させなければならない．さらにもう一つの状態 $(1, 1/2)$ が残されている．したがって ^2P 項がなければならない．この項には状態 $(0, 1/2)$ のうちの一つが対応する．最後にまだ $(0, 3/2)$ と $(0, 1/2)$ の状態が残されているから，これは ^4S 項に対応する．こうして 3 個の等価な p 電子からなる配置では $^2D, {}^2P, {}^4S$ 型の項が 1 個ずつ可能である．

第 1 表には等価な p および d 電子のいろいろな配置に許される項を列挙してある．項の記号の下につけた数字は，与えられた配置の下に存在する同じ型の項の数が 1 を越える場合にそれを示すものである．許される等価な電子の数が最も多い配置 $(s^2, p^6, d^{10}, \cdots)$ では項は常に ^1S である．ある配置の殻を満たすのに不足している電子数とちょうど同数の電子を他の配置がもつ場合，この二種の配置に属する項の型は一致することに注意しよう．これは殻の中の電子の不在は，その不在電子の状態と同じ量子数で定義される**空孔**とみなすことができることから導かれる自明な結果である．

第1表　等価な電子からなる配置に許される項

$p,\ p^5$	^2P		
$p^2,\ p^4$	$^1SD\quad {}^3P$		
p^3	$^2PD\quad {}^4S$		
$d,\ d^9$	^2D		
$d^2,\ d^8$	^1SDG	^3PF	
$d^3,\ d^7$	$^2P\underset{2}{D}FGH$	^4PF	
$d^4,\ d^6$	$^1\underset{2}{S}\underset{2}{D}F\underset{2}{G}I$	$^3\underset{2}{P}D\underset{2}{F}GH$	^5D
d^5	$^2SP\underset{3}{D}\underset{2}{F}\underset{2}{G}HI$	^4PDFG	^6S

電子配置のわかっている原子の基底項を決定するためにフントの規則を適用するときは，不飽和殻だけを考えればよい．なぜならば飽和殻の電子の角運動量は互いに打ち消しあっているからである．たとえば原子の閉殻の外側に4個のd電子があるとしよう．d電子の磁気量子数は値0, ±1, ±2をとることができる．それゆえ4個の電子がみな同じスピン投影$\sigma=1/2$をもつことができる．したがって許される最大の全スピンは$S=2$である．次に$M_L=\sum m$の値が最大になるように，いろいろなmの値を電子に割り当てなければならない．その割り当ては$2, 1, 0, -1$である．したがって$M_L=2$となる．これは$S=2$において許されるLの最大値が2に等しいことを意味している（^5D項）．

問　　題

3個の等価なp電子の系に許される状態の軌道波動関数を求めよ．

解　^4S状態では，すべての電子のスピン投影σは同じである．それゆえmの値は異なっている．波動関数は関数$\psi_0, \psi_1, \psi_{-1}$（添字は$m$の値を示す）からつくられる（61.5）の形の行列式によって与えられる．

^2D項については，許される最大の値$M_L=2$をもつ状態を考える．この場合には投影mのうち二つは1に，一つは0に等しくなるべきである．（全スピン$S=1/2$と合うように）電子2, 3は$\sigma=+1/2$をもち，電子1は$\sigma=-1/2$とする．必要な対称性をもつ軌道波動関数は

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(1)[\psi_0(2)\psi_1(3)-\psi_0(3)\psi_1(2)]$$

である（関数の引数はそれに属する電子の番号を示す）．

^2P項については，$M_L=1$をもち，また電子スピンの投影が上と同じ状態を考える．この状態はmの値の二つの異なる組によってつくることができる．したがって軌道波動関

数は次のような線形結合によって与えられる：

$$\psi = a\psi_{-111} + b\psi_{100},$$
$$\psi_{-111} = \psi_1(1)[\psi_{-1}(2)\psi_1(3) - \psi_{-1}(3)\psi_1(2)],$$
$$\psi_{100} = \psi_0(1)[\psi_1(2)\psi_0(3) - \psi_1(3)\psi_0(2)].$$

係数を決定するために $M_L = L$ の波動関数が満たすべき次の関係を使う ((27.8) 参照)：

$$\hat{L}_+\psi = (\hat{l}_+^{(1)} + \hat{l}_+^{(2)} + \hat{l}_+^{(3)})\psi = 0.$$

(27.12) の行列要素を用いれば

$$\hat{l}_+\psi_1 = 0, \qquad \hat{l}_+\psi_{-1} = \sqrt{2}\psi_0, \qquad \hat{l}_+\psi_0 = \sqrt{2}\psi_1$$

が得られる．したがって

$$\hat{L}_+\psi = \sqrt{2}(a-b)\psi_{011} = 0$$

となり，これから $a-b=0$ となる．さらに規格化条件を考慮して，$a=b=1/2$ を得る．

$M_L < L$ の状態の波動関数はわれわれの得た関数に演算子 $\hat{L}_-$ を作用させることによって得られる．

§ 68. 水素型エネルギー準位

シュレーディンガー方程式が正確に解ける唯一の原子はすべての原子の中でもっとも簡単な水素原子である．水素原子および He^+, Li^{++}, … など 1 個の電子しか含まないイオンのエネルギー準位はボーアの公式 (36.10) によって決定される：

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2\left(1+\frac{m}{M}\right)}\cdot\frac{1}{n^2}. \tag{68.1}$$

ここで Ze は核の電荷，M は核の質量，m は電子の質量である．核の質量への依存性は非常に弱いことに注意しよう．

公式 (68.1) にはいかなる相対論的効果も考えられていない．この近似では §36 ですでに述べた水素原子に特有の余分の (**偶然**) **縮退**がある：すなわち主量子数 n が一定ならばエネルギーは軌道角運動量 l に依存しない．

他の原子にも水素と性質のよく似た状態が存在する．それは電子のうちの 1 個が大きな主量子数をもつために核から遠く離れたところに主として滞在するような強い励起状態である．このような電子の運動はある近似において，有効電荷 1 をもつ《**残存原子**》がつくるクーロン場の中の運動とみなすことができる．しかしこうして得られたエネルギー準位の値はかなり不正確であり，近距離で純粋のクーロン場からのずれがあることを考慮した補正を導入しなければ

ならない．この補正がどんなものかは，つぎの考察からかんたんにわかる．

大きな量子数をもつ状態は準古典的なので，エネルギー準位はボーア＝ゾンマーフェルトの量子化規則（48.6）によって決めることができる．核からの距離が（《軌道半径》に比べて）近いところでのクーロン場からのずれは，波動関数に課される $r=0$ における境界条件の変化として形式的にとり入れることができる．これは動径運動の量子化条件の中の定数 γ を変えることである．その他の点ではこの条件は変わらないので，動径量子数，または同じことだが主量子数 n を $n+\Delta_l$ で置きかえたところが水素のエネルギー準位と違う次のようなエネルギー準位の式が得られると結論してよいだろう：

$$E=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(n+\Delta_l)^2}. \tag{68.2}$$

ここで Δ_l は（**リドベリーの補正**と呼ばれる）定数である．

リドベリーの補正は（その定義によって）n には依存しないが，もちろん励起された電子の方位量子数 l の関数である（これを Δ に添字の形で記入した）．また原子の全角運動量 L と S にも依存する．L と S が一定の場合，Δ_l は l が増大するとともに急激に減少する．l が大きくなればなるほど，電子が核の近くに来る時間は減少し，したがってエネルギー準位はますます水素型に近づくはずである[1]．

問　題

電子の水素型 s 状態の波動関数の，残存原子から遠く離れた位置での漸近式を求めよ．

解　（原子単位で）場が $U=-1/r$ となるような遠距離では，求めている関数 $\psi(r)$ はシュレーディンガー方程式

$$\psi''+\frac{2}{r}\psi'-\kappa^2\psi+\frac{2}{r}\psi=0$$

を満足する．ここで $\kappa=\sqrt{2|E|}$ である．解を $\psi=\text{const}\cdot r^{\nu}e^{-\kappa\nu}$ という形に求めよう．方程

1）一例としてヘリウム原子の励起された状態に対するリドベリーの補正の経験値を与えておこう．ヘリウム原子の全スピンは値 $S=0,1$ をとることができる．また全軌道角運動量 L は考えている状態の励起電子の角運動量 l と一致する（第2の電子は $1s$ 状態にある）．リドベリーの補正は $S=0$ の場合には

$$\Delta_0=-0.140,\qquad \Delta_1=+0.012,\qquad \Delta_2=-0.0022.$$

また $S=1$ の場合には

$$\Delta_0=-0.296,\qquad \Delta_1=-0.068,\qquad \Delta_2=-0.0029$$

である．

式の中で，ψ/r より早く減少する項を省略すると，次式が得られる：

$$\psi=\text{const}\cdot r^{1/\kappa-1}e^{-\kappa r}.$$

§ 69. 自己無撞着の場

2個以上の電子を含む原子に対するシュレーディンガー方程式は解析的な形に解くことは不可能である．このために原子の定常状態のエネルギーと波動関数の近似的計算法が意味をもってくる．これらの方法のうちもっとも重要なのが自己無撞着の場の方法と呼ばれる方法である．この方法の要点は，原子内の各電子を核と残りの全部の電子によってつくられる**自己無撞着の場**の中を運動すると考える点にある．

例としてヘリウム原子を考えよう．そしてその項としては二つの電子がともに s 状態（n は同じでも違っていてもよい）にあるものに限ることにする．そうすれば全原子の状態は S 状態である．$\psi_1(r_1)$ と $\psi_2(r_2)$ を電子の波動関数としよう．s 状態ではこれらの波動関数は電子の核からの距離 r_1, r_2 だけの関数である．全体としての原子の波動関数 $\psi(r_1, r_2)$ は全スピン $S=0$ の状態を考えるか $S=1$ の状態を考えるかによって，二つの関数の対称積

$$\psi=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)+\psi_1(r_2)\psi_2(r_1). \qquad (69.1)$$

あるいは反対称積

$$\psi=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)-\psi_1(r_2)\psi_2(r_1) \qquad (69.2)$$

の形に書かれる[1)]．このうちの第2の場合を考えよう；このとき関数 ψ_1 と ψ_2 は互いに直交していると考えることができる[2)]．

(69.2) の形の波動関数のうちで原子の真の波動関数のもっともよい近似になっているものを決定しよう．このためには (69.2) の形の関数の中だけで競り合いを許すような変分原理から出発するのが自然である（このような方法はヴェ・ア・フォック B. A. Фок によって1930年に提案された）．

よく知られているように，シュレーディンガー方程式は副条件

---

1) $S=0$ のヘリウム原子の状態はふつうパラヘリウムの状態，また $S=1$ の状態はオルソヘリウムの状態と呼ばれている．

2) 自己無撞着の場の方法によって得られる異なる電子状態の波動関数 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ は，同じ方程式の解ではなく，異なる方程式の解であるから一般には互いに直交しない．しかし (69.2) では原子全体の波動関数 ψ を変えないで ψ_2 を $\psi_2'=\psi_2+\text{const}\cdot\psi_1$ に置きかえることができる．そして適当に定数を選んで ψ_1 と ψ_2' を互いに直交するようにすることは必ずできる．

$$\iint|\psi|^2 dV_1 dV_2=1$$

の下で変分原理

$$\iint\psi^*\hat{H}\psi dV_1 dV_2=\min$$

から得られる（積分はヘリウム原子の中の2個の電子の座標について行なう）．変分からは次の方程式が導かれる：

$$\iint\delta\psi^*(\hat{H}-E)\psi dV_1 dV_2=0. \tag{69.3}$$

ここで波動関数ψの任意の変分をとれば通常のシュレーディンガー方程式が得られる．自己無撞着の場の方法では（69.3）の中のψとして式（69.2）を代入する．そして変分は関数ψ_1とψ_2について別々に行なう．いいかえれば（69.2）の形の関数ψに関する積分の極値を探す．その結果として当然，正確でないエネルギー固有値と正確でない波動関数が得られるが，しかしそれはこのような形のすべての波動関数のうちではもっともよいものである．

ヘリウム原子のハミルトニアンは次の形をしている[1]：

$$\hat{H}=\hat{H}_1+\hat{H}_2+\frac{1}{r_{12}},\qquad \hat{H}_1=-\frac{1}{2}\triangle_1-\frac{2}{r_1} \tag{69.4}$$

（r_{12}は電子間距離）．（69.2）を（69.3）に代入して変分を行ない，被積分式の中の$\delta\psi_1$と$\delta\psi_2$の係数をゼロに等しく置くと，容易に次の方程式が得られる：

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{2}\triangle+\frac{2}{r}+E-H_{22}-G_{22}(r)\right]\psi_1(r)+[H_{12}+G_{12}(r)]\psi_2(r)=0,\\ \left[\frac{1}{2}\triangle+\frac{2}{r}+E-H_{11}-G_{11}(r)\right]\psi_2(r)+[H_{12}+G_{12}(r)]\psi_1(r)=0.\end{aligned} \tag{69.5}$$

ここで

$$\begin{aligned}G_{ab}(r_1)&=\int\frac{\psi_a(r_2)\psi_b(r_2)}{r_{12}}dV_2,\\ H_{ab}&=\int\psi_a\left(-\frac{1}{2}\triangle-\frac{2}{r}\right)\psi_b dV,\quad (a,b=1,2)\end{aligned} \tag{69.6}$$

である．これが自己無撞着の場の方法によって導かれる最終的な方程式であ

1）本節および本節の問題では原子単位を採用する．

る．これらはもちろん数値的な形でしか解くことができない[1)]．

もっと複雑な場合にも，同じようにして方程式を導けばよい．変分原理の積分の中に代入すべき原子の波動関数は個別の電子の波動関数の積の線形結合の形に書かれる．この線形結合は，第1にその置換対称性が考えている原子の状態の全スピン S にふさわしいように，また第2にそれが原子の全軌道角運動量 L の与えられた値にふさわしいように選ばなければならない[2)]．

正しい置換対称性をもつ波動関数を変分原理の中で用いれば，それによって原子内の電子の交換相互作用を考慮することができる．もしもこの交換相互作用を無視し，さらにある電子配置における原子のエネルギーの L 依存性も無視すれば，もっと簡単な（しかもより精度の低い結果を生ずる）方程式が得られる (D. R. Hartree, 1928)．例としてふたたびヘリウム原子を考えると，電子の波動関数に対する方程式を通常のシュレーディンガー方程式の形にただちに書き下すことができる：

$$\left[\frac{1}{2}\triangle_a+E_a-V_a(r_a)\right]\psi_a(r_a)=0, \qquad a=1,2. \tag{69.7}$$

この中の V_a は，核の場と第2の電子の電荷分布の場の中を運動する第1の電子のポテンシャル・エネルギーである：

$$V_1(r_1)=-\frac{2}{r_1}+\int\frac{1}{r_{12}}\psi_2^2(r_2)dV_2 \tag{69.8}$$

(V_2 についても同様)．原子全体のエネルギー E を求めるためには，和 E_1+E_2 の中では2電子間の静電相互作用が2重に勘定されていることに注意しなければならない．なぜならばそれは第1の電子のポテンシャル・エネルギー $V_1(r_1)$ の中にも，第2の電子の $V_2(r_2)$ の中にも入ってくるからである．それゆえ E は和 E_1+E_2 からこの相互作用の平均値を1回引くことによって得られる．すなわち

$$E=E_1+E_2-\iint\frac{1}{r_{12}}\psi_1^2(r_1)\psi_2^2(r_2)dV_1dV_2 \tag{69.9}$$

---

1) 自己無撞着の場の方法によって計算した軽い原子のエネルギー準位と分光学的データを比較すると，この方法の精度は約5%と評価することができる（ある場合には，さらに良くなる）．しかし，複雑な原子では，隣り合う準位の間隔と誤差が同程度になり，その結果，準位の順序が狂ってしまうことがある．

2) 中心対称の場の中の電子系の波動関数を組み立てる一般的方法の解説は，271頁に挙げた Kaplan の著書に求めることができる．

である．

このような簡単化された方法を用いて得られる結果を精密化するためには，交換相互作用とエネルギーのLへの依存性を摂動としてあとから考慮すればよい．

問　題

1. 電子間相互作用を摂動と考えて，ヘリウム原子およびヘリウム型（電荷Zの核と2個の電子からなる）イオンの基底準位のエネルギーを近似的に求めよ．

解 イオンの基底状態では二つの電子はs状態にある．非摂動エネルギーの値は水素型イオンの基底準位の2倍である（電子2個のため）：

$$E^{(0)}=2(-Z^2/2)=-Z^2.$$

1次近似の補正は波動関数

$$\psi=\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)=\frac{Z^2}{\pi}e^{-Z(r_1+r_2)} \tag{1}$$

（$l=0$ の2個の水素関数の積）をもつ状態について平均した電子間相互作用エネルギーの値で与えられる．積分

$$E^{(1)}=\iint\psi^2\frac{1}{r_{12}}dV_1dV_2$$

は次のようにして容易に計算できる：

$$E^{(1)}=2\int_0^\infty dV_2\cdot\rho_2\frac{1}{r_2}\int_0^{r_2}\rho_1dV_1,\qquad dV_1=4\pi r_1^2dr_1,\qquad dV_2=4\pi r_2^2dr_2$$

（これは球対称な電荷分布 $\rho_1=|\psi_1|^2$ がつくる場の中に電荷 $\rho_2=|\psi_2|^2$ が分布するエネルギーである．dV_2 についての積分の中の被積分関数は球 $r_1<r_2$ の場の中の電荷 $\rho_2(r_2)$ のエネルギーである．積分にかかる因子2は $r_1>r_2$ となる配置からの寄与も考えたからである）．したがって $E^{(1)}=5Z/8$ が得られる．結局

$$E=E^{(0)}+E^{(1)}=-Z^2+\frac{5}{8}Z$$

となる．

ヘリウム原子ではこれは $-E=11/4=2.75$ を与える（この原子の基底状態のエネルギーの実際の値は $-E=2.90$ 原子単位$=78.9$ eV である）．

2. 前問を変分原理を用いて解け．ただし波動関数はある有効核電荷をもつ2個の水素型関数の形に近似せよ．

解 前問の式 (1) でZのかわりにZ_{eff}と書いた関数ψを用いて積分

$$\iint\psi\hat{H}\psi dV_1dV_2,\qquad \hat{H}=-\frac{1}{2}(\triangle_1+\triangle_2)-\frac{Z}{r_1}-\frac{Z}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}$$

を計算しよう．

ψ^2/r_{12} の積分は問題1と同じように計算される．$\psi\triangle_1\psi$ の積分は，シュレーディンガー

方程式

$$\left(-\frac{1}{2}\triangle_1-\frac{Z_{\rm eff}}{r_1}\right)\psi_1=-\frac{1}{2}Z_{\rm eff}^2\psi_1$$

が成り立つことに気づけば，ψ^2/r_1 の積分に還元できる．そうして次の結果が得られる：

$$\iint\psi\hat{H}\psi dV_1dV_2=Z_{\rm eff}^2-2ZZ_{\rm eff}+\frac{5}{8}Z_{\rm eff}.$$

$Z_{\rm eff}$ の関数としてのこの式は $Z_{\rm eff}=Z-\frac{5}{16}$ のところに極小をもつ，対応するエネルギーの値は

$$E=-\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2$$

である．ヘリウム原子では，これは $-E=2.85$ を与える．上に求めた $Z_{\rm eff}$ の値をもつ波動関数 (1) は実際には (1) の形のすべての関数のうちだけでなく，和 r_1+r_2 だけに依存するもっと一般的な関数のうちでも最良であることに注意しよう．

§ 70. トーマス=フェルミの方程式

自己無撞着の場の方法による原子内の電荷分布と場の数値計算は，複雑な原子の場合には特に，非常にぼう大なものとなる．しかし複雑な原子に適した別の近似法が存在する．この方法の利点はその簡単さにある．もちろんこの方法は自己無撞着の場の方法よりもかなり精度の悪い結果を与える．

この方法 (E. Fermi, L. Thomas, 1927) の基礎をなすのは，多数の電子をもつ複雑な原子では大部分の電子が比較的大きな量子数をもっているという事実である．この条件の下では準古典的近似が適用できる．したがってわれわれは《位相空間中の細胞》という概念 (§ 48) を原子内の個別の電子の状態に適用できる．

p より小さな運動量をもち，また物理空間の体積要素 dV の中にある電子に対応する位相空間の体積は $\frac{4}{3}\pi p^3dV$ に等しい．この体積には $\frac{4\pi p^3dV}{3(2\pi)^3}$ 個の細胞，すなわち可能な状態が対応し[1]，この中には同時に

$$2\frac{4\pi p^3}{3(2\pi)^3}dV=\frac{p^3}{3\pi^2}dV$$

個までの電子を入れられる（各細胞には 2 個ずつ逆向きスピンの電子が入る）．原子の基底状態では，各体積要素 dV 内にある電子は（位相空間の中の）ゼロからある最大値 p_0 までの運動量に対応する細胞を埋めなければならない．

1) 本節では原子単位を採用する．

このとき電子の運動エネルギーは各点でできるだけ小さな値をとろうとするだろう．体積 dV 内の電子数を ndV（ここで n は電子数密度）と書けば，各点において電子の運動量の最大値 p_0 は次の関係で n と結ばれているといえるだろう：

$$\frac{p_0^3}{3\pi^2}=n.$$

したがって，電子密度が n である点における電子の運動エネルギーの最大値は

$$\frac{p_0^2}{2}=\frac{1}{2}(3\pi^2 n)^{2/3} \tag{70.1}$$

に等しい．

つぎに $\varphi(r)$ を静電ポテンシャルとしよう．これは無限遠でゼロになると考える．電子の全エネルギーは $p^2/2-\varphi$ である．各電子の全エネルギーが負でなければならないことは明らかである．さもないと電子は無限遠に行ってしまう．各点における電子の全エネルギーの最大値を $-\varphi_0$ であらわそう．この φ_0 は正の定数である（もしもこの量が定数でなければ，電子は小さな φ_0 をもつ点から大きな φ_0 をもつ点へと移動する）．したがって次のように書くことができる：

$$\frac{p_0^2}{2}=\varphi-\varphi_0. \tag{70.2}$$

式 (70.1) と (70.2) を等しいと置けば

$$n=[2(\varphi-\varphi_0)]^{3/2}\frac{1}{3\pi^2} \tag{70.3}$$

が得られる．これは原子内の各点における電子密度とポテンシャルを結ぶ関係である．

$\varphi=\varphi_0$ となるところで密度 n はゼロになる．また $\varphi<\varphi_0$ であって関係式 (70.2) から負の極大運動エネルギーが得られるようなすべての領域でも，明らかに n はゼロに等しいと置かなければならない．したがって方程式 $\varphi=\varphi_0$ は原子の境界を定義している．ところで全電荷がゼロに等しい中心対称な電荷分布の外には場は存在しない．したがって，中性原子の境界上では $\varphi=0$ となるべきである．これから中性原子では定数 φ_0 をゼロに置かなくてはならないことになる．これとは逆にイオンでは定数 φ_0 はゼロではない．

以下では中性原子を考えることとし，したがって $\varphi_0=0$ と置く．ポアッソンの静電方程式によって $\Delta\varphi=4\pi n$ となる．これに (70.3) を代入すると**トーマス=フェルミの方程式**

$$\Delta\varphi=\frac{8\sqrt{2}}{3\pi}\varphi^{3/2} \tag{70.4}$$

が得られる．

原子の基底状態における場の分布は，この方程式の中心対称の解のうち次の境界条件を満たすものによって決められる：まず $r\to 0$ で場は核のクーロン場にならなければならない．すなわち $\varphi r\to Z$ とならなければならない．また $r\to\infty$ で $\varphi r\to 0$ とならなければならない．変数 r のかわりに，定義式

$$r=xbZ^{-1/3},\qquad b=\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}=0.885 \tag{70.5}$$

によって新しい変数 x を導入し，また φ のかわりに

$$\varphi(r)=\frac{Z}{r}\chi\left(\frac{rZ^{1/3}}{b}\right)=\frac{Z^{4/3}}{b}\frac{\chi(x)}{x} \tag{70.6}$$

によって定義される新しい未知関数 χ を導入すれば[1]，次の方程式が得られる：

$$x^{1/2}\frac{d^2\chi}{dx^2}=\chi^{3/2}. \tag{70.7}$$

また境界条件は $x=0$ で $\chi=1$，$x=\infty$ で $\chi=0$ となる．この方程式はもはやいかなるパラメーターも含まないので普遍関数 $\chi(x)$ を定める．第2表には方程式 (70.7) を数値積分して得られたこの関数の値を与えてある．

関数 $\chi(x)$ は単調に減少して無限遠ではじめてゼロになる[2]．いいかえれば，トーマス=フェルミ模型では原子は境界をもたず，形式的には無限遠まで拡がっている．$x=0$ における微係数 $\chi'(x)$ の値は $\chi'(0)=-1.59$ に等しい．それゆえ関数 $\chi(x)$ は $x\to 0$ で $\chi\approx 1-1.59x$ という形をとり，したがってポテンシャル $\varphi(r)$ は

---

1) 通常の単位では

$$\varphi(r)=\frac{Ze}{r}\chi\left(\frac{rZ^{1/3}}{0.885}\frac{me^2}{\hbar^2}\right).$$

2) 方程式 (70.7) は無限遠でゼロになる厳密解 $\chi(x)=144x^{-3}$ をもっている．しかし，これは $x=0$ で境界条件を満足しない．これを x が大きいところの関数 $\chi(x)$ の漸近式として用いることはできる．しかしこの式がある程度正確な値を与えるのは x の非常に大きなところに限られる．ところがこのような遠距離ではトーマス=フェルミの方程式そのものが一般に適用できなくなる (以下参照)．

$$\varphi(r) \approx \frac{Z}{r} - 1.80 \cdot Z^{4/3} \tag{70.8}$$

となる．第1項は核の場のポテンシャルである．また第2項は電子によって座標原点につくられるポテンシャルである．(70.3) に (70.6) を代入すれば，電子密度として次式が得られる：

$$n = Z^2 f\left(\frac{rZ^{1/3}}{b}\right), \qquad f(x) = \frac{32}{9\pi^3}\left(\frac{\chi}{x}\right)^{3/2}. \tag{70.9}$$

第 2 表　関数 $\chi(x)$ の値

x	$\chi(x)$	x	$\chi(x)$	x	$\chi(x)$
0.00	1.000	1.4	0.333	6	0.0594
0.02	0.972	1.6	0.298	7	0.0461
0.04	0.947	1.8	0.268	8	0.0366
0.06	0.924	2.0	0.243	9	0.0296
0.08	0.902	2.2	0.221	10	0.0243
0.10	0.882	2.4	0.202	11	0.0202
0.2	0.793	2.6	0.185	12	0.0171
0.3	0.721	2.8	0.170	13	0.0145
0.4	0.660	3.0	0.157	14	0.0125
0.5	0.607	3.2	0.145	15	0.0108
0.6	0.561	3.4	0.134	20	0.0058
0.7	0.521	3.6	0.125	25	0.0035
0.8	0.485	3.8	0.116	30	0.0023
0.9	0.453	4.0	0.108	40	0.0011
1.0	0.424	4.5	0.0919	50	0.00063
1.2	0.374	5.0	0.0788	60	0.00039

トーマス=フェルミ模型では種々の原子の電荷密度分布は似通っており，$Z^{-1/3}$ (通常単位では $\hbar^2/me^2Z^{1/3}$，すなわちボーア半径を $Z^{1/3}$ で割ったもの) が長さの特性パラメーターの役目をしていることがわかる．もしも距離を原子単位ではかれば，たとえば電子密度の極大になる距離はあらゆる Z に対して同一である． それゆえ原子番号 Z の原子内の電子の大部分は核から $Z^{-1/3}$ 程度の距離のところにあるということができる．数値計算の示すところによると，原子の全電荷の半分は半径 $1.33Z^{-1/3}$ の球の内部にある．

同様な考察から，原子内の電子の平均速度は (大ざっぱにそのエネルギーの平方根と考えて) $Z^{2/3}$ の程度であることが示される．

トーマス=フェルミの方程式は核にあまり近いところや核からあまり遠いところには適用できない．その適用領域は r の小さい方は不等式 (49.12) によって制限されている；核のクーロン場の核にもっとも近い距離では準古典的近似が使えなくなるからである．(49.12) の中で $\alpha=Z$ と置くと，この距離の下限として $1/Z$ が得られる．準古典的近似は複雑な原子の中でも r が大きいところで使えなくなる．すなわち容易にわかるように，$r\sim1$ では電子のド・ブロイ波長はこの距離の程度になり，準古典性の条件が完全に破れてしまう．このことは方程式 (70.2), (70.4) の中の項の大きさを当たってみればわかる．しかし方程式 (70.4) は Z を含まないので，結果は計算しなくてもすでに明白である．したがって，トーマス=フェルミの方程式の適用できる範囲は $1/Z$ に比べれば遠く，1 に比べれば近い距離の領域に限られる．しかし，複雑な原子では大部分の電子は実際この領域に入っている．

このことは，原子の《境界》がトーマス=フェルミ模型ではほぼ $r\sim1$ のところにあること，すなわち原子の寸法は Z に依存しないことを意味している．さらに，外殻電子のエネルギーが，したがって原子のイオン化ポテンシャルが Z に依存しないこともわかる[1]．

トーマス=フェルミの方法を用いれば，全イオン化エネルギー E，すなわち中性原子から全部の電子をとり去ってしまうために要するエネルギーを計算できる．そのためには，原子内の電荷がトーマス=フェルミ分布をしているときの静電エネルギーを計算しなければならない．求める全エネルギーはこの静電エネルギーの半分に等しい．なぜならば，クーロンの法則で相互作用する粒子系において，平均の運動エネルギーは（ビリアル定理（第 I 巻『力学』§10 参照）によって）平均のポテンシャル・エネルギーの半分に負号をつけたものに等しいからである．E の Z への依存性は次のような簡単な考察からてっとり早く求めることができる：電荷 Z をもつ核の場の中で核から平均距離 $Z^{-1/3}$ のところにある Z 個の電子の静電エネルギーは $Z\cdot Z/Z^{-1/3}=Z^{7/3}$ に比例する．数値計算は $E=20.8Z^{7/3}\,\mathrm{eV}$ という結果を与える．この Z への依存性は実験データ

1) もちろんこの模型は，元素の周期律にあらわれているような，原子の寸法とイオン化ポテンシャルの Z への周期的依存性を反映していない．さらに実験データの示すところによれば，Z を増したとき原子の寸法はわずかではあるが系統的に増大し，イオン化ポテンシャルは減少する．

とよく一致している．係数の経験値は16に近い．

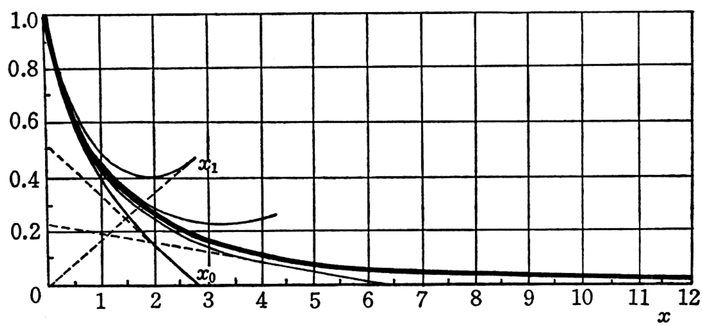
定数φ_0のゼロでない正の値が，イオン化された原子に対応することは，すでに触れたとおりである．もしも$\varphi-\varphi_0=Z\chi/r$によって関数$\chi$を定義すると，$\chi$に対して前と同じ方程式（70.7）が得られる．ただしわれわれにとって興味があるのは，今度は中性原子の場合のような無限遠でゼロになる解ではなく，有限の値$x=x_0$でゼロになる解である．このような解は任意のx_0に対して存在する．点$x=x_0$では電荷密度は，χと同じくゼロになるが，ポテンシャルは有限のままである．x_0の値は次のようにしてイオン化の価数と関連づけられる．半径rの球の内部の全電荷はガウスの定理によって

$$-r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}=Z[\chi(x)-x\chi'(x)]$$

に等しい．ここで$x=x_0$と置けば，イオンの全電荷zが得られる．すなわち$\chi(x_0)=0$であるから，これは

$$z=-Zx_0\chi'(x_0) \tag{70.10}$$

になる．第23図の太線は中性原子に対する曲線$\chi=\chi(x)$をあらわしている．またその下の方には異なるイオン化度のイオンに対する2曲線が描かれている．z/Zは，この図上では点$x=x_0$でこの曲線に接する直線が縦軸から切りとる切片になっている．



第 23 図

また方程式（70.7）は，いかなるところでもゼロにならない解をもっている．このような解は無限遠で発散する．これは定数φ_0の負の値に対応する解と考えることができる．上の第23図にはこのような曲線$\chi=\chi(x)$も二つ描いて

ある．これらは中性原子に対する曲線の上の方を通っている．また

$$\chi(x_1)-x_1\chi'(x_1)=0 \tag{70.11}$$

なる点 $x=x_1$ において，$x<x_1$ なる球の内部に含まれる全電荷はゼロになる（図上ではこの点は明らかに座標原点を通る接線がこの曲線に接する点である）．この点で曲線を切ってしまうと，これは境界で電荷密度がゼロにならないような中性原子に対する $\chi(x)$ を定義しているということができる．物理的にはこれはある有限の体積内に閉じ込められた《圧縮された》原子に対応している[1]．

トーマス=フェルミの方程式は電子間の交換相互作用は考慮していない．この相互作用に関連した効果は，$Z^{-2/3}$ について次の次数の量である．したがってトーマス=フェルミの方法に交換相互作用をとり入れようとすると，それと同時にすべてのこれと同じ次数の効果をとり入れることが要求される[2]．

問　題

中性原子内の電子間の静電相互作用エネルギーと電子-核相互作用のエネルギーの間の関係をトーマス=フェルミ模型によって求めよ．

解　電子によってつくられる場のポテンシャル φ_e は，全ポテンシャルから核の場のポテンシャル Z/r を引けば得られる．それゆえ電子間相互作用のエネルギーは

$$U_{ee}=-\frac{1}{2}\int\varphi_e n dV=\frac{Z}{2}\int\frac{n}{r}dV-\frac{1}{2}\int\varphi n dV=\frac{Z}{2}\int\frac{n}{r}dV-\frac{(3\pi^2)^{2/3}}{4}\int n^{5/3}dV$$

である［(70.3) により φ を n であらわした］．一方電子と核の相互作用エネルギー U_{en} と電子の運動エネルギー T は，それぞれ

$$U_{en}=-Z\int\frac{n}{r}dV,$$

$$T=2\iint_0^{p_0}\frac{p^2}{2}\frac{4\pi p^2dp}{(2\pi)^3}dV=\frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10}\int n^{5/3}dV$$

に等しい．

これらの式を前の等式と比較すれば次の関係が得られる：

$$U_{ee}=-\frac{1}{2}U_{en}-\frac{5}{6}T.$$

これと同時にビリアル定理（第Ｉ巻『力学』§10 参照）によって，クーロンの法則に従

1）このような考察は強く圧縮された物質の状態方程式の研究に有用であろう．

2）これはア・エス・カンパニェーツとイェ・エス・パブロフスキーによって（А. С. Компанейци, Е. С. Павловский ЖЭТФ **31**, 427 (1956)），またデ・ア・キルジニツによって（Д. А. Киржниц, ЖЭТФ **32**, 115 (1957)）なされた．

って相互作用する粒子系では

$$2T=-U=-U_{en}-U_{ee}$$

が成り立っている．したがって結局次の関係が得られる：

$$U_{ee}=-\frac{1}{7}U_{en}.$$

§ 71. 核の近傍における外殻電子の波動関数

われわれは（トーマス=フェルミの模型に基づいて）（Z の大きい）複雑な原子の外殻電子は核から $r\sim1$ の距離に主としてあることを見た[1]．しかし多くの原子的性質は核の近傍の電子密度に強く依存している（§72と§120では，このような性質をとり扱う）．電子密度の大体の大きさを求めるために，r を遠距離（$r\sim1$）から近距離まで変えたときの原子内の電子の波動関数 $\psi(r)$ の変化を追究しよう．

$r\sim1$ の領域では核の場は残りの電子によってさえぎられている．したがって，ポテンシャル・エネルギーは $U(r)\sim1/r\sim1$ である．この場の中の電子のエネルギー準位は $E\sim1$ である．電荷 Z の場のボーア半径の程度の距離 $r\sim1/Z$ では，核の場はさえぎられていないと考えられる．したがって $U=-Z/r$ である．中間領域 $1/Z\ll r\ll1$ では，ポテンシャル・エネルギー $|U|$ は電子のエネルギー E に比べて大きく，条件

$$\frac{d}{dr}\frac{1}{p}\sim\frac{d}{dr}\frac{1}{\sqrt{|U|}}\ll1$$

がみたされており（p は運動量），したがって電子の運動は準古典的である．球対称の準古典的波動関数は，$1/Z\ll r\ll1$ なる r に対して

$$|\psi(r)|\sim\frac{1}{r\sqrt{p}}\sim\frac{1}{r|U|^{1/4}} \tag{71.1}$$

となる．この式の係数の大体の大きさ（~1）は，$r\sim1$ における波動関数に《つながる》ための条件 $\psi\sim1$ から決めた[*]．

$r\sim1/Z$ のところへ式（71.1）を適用すると（この中で $U=-Z/r$ と置く），核の近くの波動関数の値が，どの程度になるか求めることができ

1）本節では原子単位を採用する．

*）§49参照．ここの $\psi(r)$ は§32の $R(r)=\chi(r)/r$ に対応する（訳注）．

る[1]：

$$\psi\left(\frac{1}{Z}\right)\sim\sqrt{Z}. \tag{71.2}$$

中心対称の場の中の波動関数の一般的性質 (§ 32) によれば，距離をさらに縮めたとき $\psi(r)$ は大きさの程度を一定に保つか（s 電子の場合），減少しはじめるか（$l\neq 0$ の場合），どちらかになる．

電子が $r\lesssim 1/Z$ の領域にある確率は

$$w\sim|\psi|^2r^3\sim\frac{1}{Z^2} \tag{71.3}$$

である．もちろん公式 (71.2)-(71.3) は Z の増加に伴う諸量の変化の系統的傾向を与えるにすぎず，ある元素から次の元素へ移る際の非系統的変化を考慮してはいない．

§ 72. 原子準位の微細構造

電子間相互作用に対する相対論的効果の公式を導くことは，本教程の他の巻（第Ⅳ巻『相対論的量子力学』§ 33, § 83）にゆずることにして，この節では，原子の多重項の研究にこの効果を応用する場合の一般的記述法だけを述べておこう．

原子のハミルトニアンの中の相対論的項は二つのカテゴリーに分類されることが知られている．その一つは電子のスピン演算子について1次，他の一つは2次の項である．第1の項は電子の軌道運動とそのスピンとの相互作用に対応し，**スピン-軌道相互作用**と呼ばれている．第2の項は電子のスピン間の相互作用に対応する（**スピン-スピン相互作用**）．この二つの型の相互作用は v/c——電子速度の光速度に対する比——について同じ次数（2次）の量である．しかし実際には，重い原子ではスピン-軌道相互作用の方がスピン-スピン相互作用を大幅に上回る．これはスピン-軌道相互作用が原子番号の増加とともに急激に増大するのに，スピン-スピン相互作用の方は一般にほとんど Z に依存しないことと関連している（以下参照）．

スピン-軌道相互作用の演算子は次の形をしている：

---

1)（$r\sim 1$ の領域で波動関数が知られているとき）この公式の中の係数を決めようとすると，$r\lesssim 1/Z$ の領域で式 (36.25) を用いることが必要になるだろう．

$$\hat{V}_{sl}=\sum_a \hat{A}_a\hat{s}_a \tag{72.1}$$

(和は原子内の全電子について行なう)． ここで $\hat{s}_a$ は電子のスピン演算子， また $\hat{A}_a$ はある《軌道》演算子，すなわち座標の関数に作用する演算子である．自己無撞着の場の近似では演算子 $\hat{A}_a$ は電子の角運動量演算子 $\hat{l}_a$ に比例する．したがって $\hat{V}_{sl}$ は次の形に書くことができる：

$$\hat{V}_{sl}=\sum \alpha_a \hat{l}_a\hat{s}_a. \tag{72.2}$$

このとき和の中の係数は，自己無撞着の場の中の電子のポテンシャル・エネルギー $U(r)$ によって次のようにあらわされる：

$$\alpha_a=\frac{\hbar^2}{2m^2c^2r_a}\frac{dU(r_a)}{dr_a}. \tag{72.3}$$

$|U(r)|$ は核から離れるに従って減少するので，必ず $\alpha_a>0$ である．

相互作用 (72.2) を摂動とみなせば，エネルギーを計算するためにはそれを非摂動状態について平均しなければならない．このときこのエネルギーに主要な寄与をするのは核への距離が近い領域，すなわち電荷 Ze の核に対するボーア半径 ($\sim\hbar^2/Zme^2$) の程度の距離の領域である．この領域では核の場はほとんどさえぎられておらず，ポテンシャル・エネルギーは

$$\left|U(r)\right|\sim\frac{Ze^2}{r}\sim\frac{Z^2me^4}{\hbar^2}$$

となる．したがって

$$\alpha\sim\frac{\hbar^2U}{m^2c^2r^2}\sim Z^4\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{me^4}{\hbar^2}$$

である．α の平均値は，これに電子が核近傍に滞在する確率 w を掛ければ得られる．(71.3) によれば $w\sim Z^{-2}$ である．したがって電子のスピン-軌道相互作用のエネルギーは結局

$$\bar{\alpha}\sim\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2\frac{me^4}{\hbar^2}$$

となる．つまり原子の外殻電子の基底エネルギー ($\sim me^4/\hbar^2$) に比べて因子 $(Ze^2/\hbar c)^2$ だけ異なることになる． この因子は原子番号の増加とともに急激に増大し，重い原子では 1 の程度の大きさに達する．

摂動演算子 (72.2) の電子殻の非摂動状態による実際の平均は 2 段階に分けて行なわれる．まずはじめに全軌道角運動量とスピンの大きさ L と S の与えら

れた原子の電子状態で平均する．しかしそれらの方向については平均しない．このような平均をしても $\hat{V}_{sl}$ はもちろんまだ演算子であるが，もはや（原子中の個別の電子ではなく）原子全体を一括して特徴づける量の演算子のみで表わされている．そのような演算子は $\hat{\boldsymbol{L}}$ と $\hat{\boldsymbol{S}}$ である．

このような平均を行なったスピン-軌道相互作用を $\hat{V}_{SL}$ と書こう．$\hat{\boldsymbol{S}}$ について線形なので，それは次の形をしている：

$$\hat{V}_{SL}=A\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{L}}. \qquad (72.4)$$

ここで A は与えられた（分裂していない）項に特有な定数である．すなわち，A は S と L に依存するが原子の全角運動量 J には依存しない[1]．

縮退した準位のエネルギーの分裂を計算するためには，演算子（72.4）の行列要素からつくられる永年方程式を解かなくてはならない．しかし今の場合，われわれは行列 V_{SL} を対角にする正しいゼロ次近似の関数をすでに知っている．これは全角運動量 J が確定値をもつ状態の波動関数である．この状態で平均することは，演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{L}}$ をその固有値で置きかえることである．そしてこれは（31.3）によって

$$\boldsymbol{LS}=\frac{1}{2}[J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)]$$

に等しい，多重項のすべての成分について L と S の値は同じであり，またわれわれにはその相対的な位置だけが問題なので，エネルギーの分裂は次の形に書くことができる：

$$\frac{1}{2}AJ(J+1). \qquad (72.5)$$

したがって，（数 J と $J-1$ で指定される）相隣る成分の間隔は

$$\varDelta E_{J,J-1}=AJ \qquad (72.6)$$

に等しい．この公式はいわゆる**ランデの間隔規則**（A. Landé, 1923）をあらわ

1）ここに書いた演算の意味をもっとはっきりさせるために，次のことを思い起こしてみよう：一般に量子力学では，平均は対応する対角行列要素をとることである．だから部分的平均は，系の状態を指定する全量子数のうちのあるものについてだけ対角な行列要素の組をつくることである．したがっていまの場合には，演算子（72.2）の平均は，許されるすべての M_L，M_L' と M_S, M_S' をもち，しかもそれ以外のすべての量子数（それらをまとめて n と書いた）については対角な要素 $\langle nM_L'M_S'|V_{sl}|nM_LM_S\rangle$ からなる行列を作ることを意味している．したがって，演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}$ と $\hat{\boldsymbol{L}}$ は，その要素が公式（27.13）で与えられるような行列 $\langle M_S'|\boldsymbol{S}|M_S\rangle$ と $\langle M_L'|\boldsymbol{L}|M_L\rangle$ であると考えるべきである．同様の段階的平均法は，これからも再三使うことになるであろう．

している．

定数 A は正のこともあるし負のこともある．$A>0$ の場合は，多重項成分の最低準位は許さる最小の J，すなわち $J=|L-S|$ をもつ準位である．このような多重項を**順多重項**という．もしも $A<0$ ならば，$J=L+S$ の準位が最低である（**逆多重項**）．

不飽和殻を一つだけもつような電子配置であれば，原子の基底状態について A の符号を定めることは容易である．もしもこの殻の満たされ方が半分以下であれば，フントの規則（§67）によって，この中の n 個の電子はみな平行なスピンをもっている．したがって全スピンは許される最大値 $S=n/2$ をもっている．式（72.2）に $\boldsymbol{s}_a=\boldsymbol{S}/n$ を代入し，（同じ殻のすべての電子に共通な）α_a を和の記号の前に出すと

$$\hat{V}_{SL}=\frac{\alpha}{2S}\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{L}}$$

が得られる．すなわち $A=\alpha/2S>0$ である．もしも殻が半分以上埋まっていれば，その自由な空席——不飽和殻中の《空孔》——についての同様な和をあらかじめ（72.2）に加え，そしてふたたび引いておく．飽和殻では $V_{sl}=0$ であるから，結局演算子 $\hat{V}_{sl}$ は《空孔》だけについて和 $\hat{V}_{sl}=-\sum\alpha_a\hat{\boldsymbol{l}}_a\hat{\boldsymbol{s}}_a$ の形にあらわされ，それと同時に原子の全スピンと軌道角運動量も $\boldsymbol{S}=-\sum\boldsymbol{s}_a$，$\boldsymbol{L}=-\sum\boldsymbol{l}_a$ とあらわされる．それゆえ前と同じ方法によって $A=-\alpha/2S$，すなわち $A<0$ が得られる．

上述のことから，一つの不飽和殻をもつ原子の基底状態の J の値を定める簡単な規則が導かれる．もしも，この中に許される最大限の半分以下の数の電子しか含まれていなければ $J=|L-S|$ である．またもしも，殻が半分以上満たされていれば $J=L+S$ である．

すでに述べたように，スピン-スピン相互作用はスピン-軌道相互作用と違ってほとんど Z に依存しない．これは電子間に働く直接相互作用であって，核の場とは無関係なその本性からむしろ当然のことである．

平均化されたスピン-スピン相互作用演算子としては，公式（72.4）と類似の $\hat{\boldsymbol{S}}$ について2次の式が得られなければならない．$\hat{\boldsymbol{S}}$ について2次の式は $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ と $(\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{L}})^2$ である．このうち第1のものは J に依存しない固有値をもっている．

それゆえ項の分裂には効かない．したがってこれを落とすことができて

$$\hat{V}_{SS}=B(\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{L}})^2 \tag{72.7}$$

と書くことができる．ここで B は定数である．この演算子の固有値には J に依存しない項，$J(J+1)$ に比例する項，そして最後に $J^2(J+1)^2$ に比例する項が含まれている．このうち第1項は分裂を与えないので興味がない．第2項は式(72.5) の中にくり込むことができる．これは単に定数 A をいくらか変えることと同等である．最後の第3項は多重項のエネルギーに表式

$$\frac{B}{4}J^2(J+1)^2 \tag{72.8}$$

を加える．

§66–§67 に述べられた原子準位の組み立て方式は，電子の軌道角運動量はまとめられて原子の全軌道角運動量 L になり，電子のスピンは全スピン S になるという仮定に基づいている．すでに指摘したように，このような見方は相対論的効果が小さいという条件の下でのみ可能である．もっと正確には，微細構造の間隔が異なる L, S をもつ準位の差に比べて小さくなければならない．このような近似は**ラッセル=ソーンダーズ結合** (Russel, Saunders, 1925) と呼ばれている．また $\boldsymbol{LS}$ **結合**ともいう．

しかし実際には，この近似の適用範囲は限られている．軽い原子の準位は LS 方式で組み立てられるが，原子番号が増えるに従って原子内の相対論的相互作用が強くなり，ラッセル=ソーンダーズの近似は適用できなくなる[1]．またこの近似は，たとえば1個の電子が大きい n の状態にあり，そのため核から遠距離のところに主として滞在しているような強く励起された原子の状態 (§68) にも適用できないことを強調しておかなくてはならない．この電子と残りの電子の運動との静電的相互作用は比較的弱いが，《残存原子》中では相対論的相互作用は弱くならない．

逆の極限の場合には，静電的相互作用（より正確には，静電的相互作用のうちで，エネルギーの L と S への依存性の原因となる部分）に比べて相対論的相互作用は大きい．この場合には軌道角運動量とスピンを別々に語ることはでき

1) この結合方式を記述する公式は定量的には適用不能になるけれども，この方式に従う準位の分類法自体はもっと重い原子に対してでも，とくに（基底状態を含む）最も低い準位に対しては，意味をもっている．

ない．それらは保存しないからである．個別の電子はそれ自身の全角運動量 j によって指定され，この j がまとまって原子の共通の全角運動量 J になる．このような原子準位の組み立て方式を **jj 結合** という．現実にはこの結合方式は純粋な形では存在しない．ひじょうに重い原子の準位の中には，LS 型と jj 型の中間のさまざまな型の結合が見いだされている[1]．

いくつかの強く励起された状態では特異な結合型が見いだされている．ここでは《残存原子》はラッセル=ソーンダーズの状態にある．すなわち L, S の値で指定される状態にある．これと強く励起された電子の結合は jj 型に従って行なわれる（これはこの電子の静電的相互作用が弱いためである）．

水素原子のエネルギー準位の微細構造はいくつかの特異な性質をもっている．これは本教程の別の巻で計算されるだろう（第Ⅳ巻『相対論的量子力学』§34 参照）．ここでは主量子数 n を与えたときエネルギーは電子の全角運動量 j にのみ依存することを指摘するにとどめよう．したがって準位の縮退は完全にはとれない．一定の n と j をもつ準位には軌道角運動量が $l=j\pm1/2$ の二つの状態が対応する（ただし j が，n を与えたときに許される最大値 $j=n-1/2$ をとらならない限り）．したがって，$n=3$ の準位は三つの準位に分かれる．そのうち第1は状態 $s_{1/2}, p_{1/2}$ に，第2は $p_{3/2}, d_{3/2}$ に，また第3は $d_{5/2}$ の状態に対応している．

§ 73. メンデレーエフの元素の周期律

デ・イ・メンデレーエフ（Д. И. Менделеев, 1869）によって明らかにされた周期性，すなわち，原子番号の増加する順序に並べた一連の元素に見られる性質変化の周期性を説明するためには，原子の電子殻を逐次占有していく場合の特異性を考察する必要がある（N. Bohr, 1922）．

ある原子から次の原子に移ると，電荷が一つ増え，殻には1個の電子が加えられる．ちょっと考えると順々に加えられる各電子の結合エネルギーは原子番号の増加とともに単調な変化を示すことが期待されそうだが，実状はそうでは

1）この型の結合ならびにこの問題の定量的側面についてのもっと詳しいことは，たとえば次の教科書を参照せよ：E. U. Condon and G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, 1935.

ない.

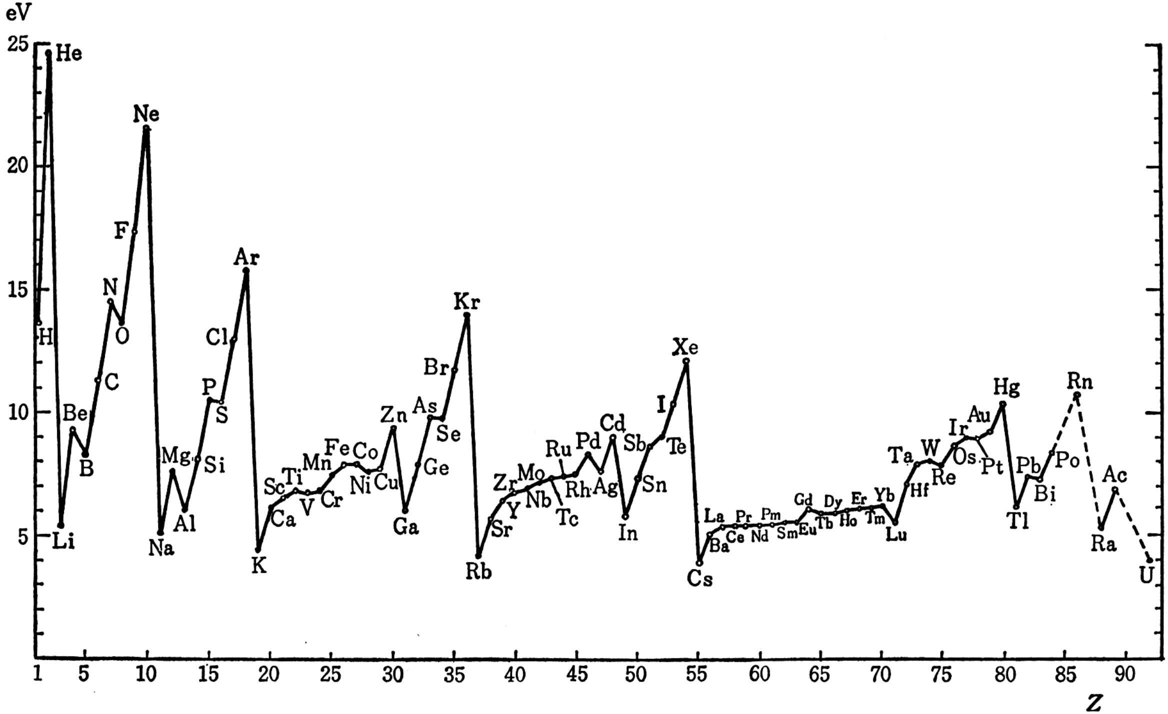
水素電子の基底状態ではたった1個の電子が 1*s* 状態にある. 次の元素であるヘリウム原子では, もう一つの電子が同じ 1*s* 状態に加わる. しかしヘリウム原子内の各 1*s* 電子の結合エネルギーは水素原子内の電子の結合エネルギーよりもいちじるしく大きい. このことはH原子内の電子が感ずる場と He^+ イオンにつけ加えられた電子が感ずる場との相違からくる自然な帰結である. これらの場は遠方では大体一致するが, 核の近傍では電荷 $Z=2$ をもつ He^+ イオンの場は $Z=1$ の水素原子の核の場よりも強力である.

リチウム($Z=3$)原子では第3の電子は 2*s* 状態に入る. なぜならば 1*s* 状態には同時に2個より多くの電子は入れないからである. Z が一定のとき 2*s* 準位は 1*s* 準位より上にある; また核電荷が増すに従ってどちらの準位も低下する. しかし $Z=2$ から $Z=3$ へ移るときには第1の効果の方が第2の効果よりいちじるしく優っている. それゆえ Li 原子内の第3の電子の結合エネルギーはヘリウム原子内の電子の結合エネルギーよりもいちじるしく小さい. 次に Be ($Z=4$) から Ne ($Z=10$) までの原子では, はじめに 2*s* 電子がもう一つ, それから 2*p* 電子が6個順々に加えられる. この系列に加えられる電子の結合エネルギーは, 核電荷が増大するため大体において大きくなる. 次の Na 原子 ($Z=11$) に移るときに加えられる電子は 3*s* 状態に入る. このとき, 高位の殻へ移る効果の方が核電荷の増える効果より優っているため, 結合エネルギーはふたたび大きく低下する.

電子殻の占有のこのような図式は元素の全系列にわたって示される特徴である. すべての電子状態は次々に占有されて行く族に分類される. 各族の元素列の中で占有が進むにつれて結合エネルギーは大きくなる. しかし次の族の状態が占有されはじめたとたん, 結合エネルギーは大きく低下する.

第24図には分光学のデータからわかった元素のイオン化ポテンシャルを引用してある. これは, ある元素から次の元素へ移るときに加えられる電子の結合エネルギーを与えている.

種々の状態は順々に占有される次のような族に分類される:


eV
25
20
15
10
5
1 5 10 15 20 25 30 35 40 45 50 55 60 65 70 75 80 85 90
Z
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe Cs Ba La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po Rn Ra Ac U

第 24 図

$$
\begin{array}{ll}
1s \cdots\cdots\cdots\cdots & 2\ \text{電子}, \\
2s,\ 2p \cdots\cdots\cdots & 8\ \text{電子}, \\
3s,\ 3p \cdots\cdots\cdots & 8\ \text{電子}, \\
4s,\ 3d,\ 4p \cdots\cdots & 18\ \text{電子}, \\
5s,\ 4d,\ 5p \cdots\cdots & 18\ \text{電子}, \\
6s,\ 4f,\ 5d,\ 6p \cdots & 32\ \text{電子}, \\
7s,\ 6d,\ 5f \cdots &
\end{array}
\tag{73.1}
$$

第1族はHとHeで一杯になる．第2および第3族の占有は周期律表のはじめの2つの（短）周期に対応し，それぞれ8元素を含んでいる．次に18元素からなる2つの長周期と，希土類元素を含めて合計32の元素からなる長周期がこれに続く．最後の状態族は自然に存在する（および人工超ウラン）元素では完全には一杯にならない．

各族の状態を占有してゆく場合の元素の性質の変化のようすを理解するためは，sやp状態とは区別されるdおよびf状態の以下のような特異性が重要である．重い原子内の電子の（静電場と遠心力場からなる）中心対称な場の有効ポテンシャル・エネルギー曲線は，座標原点の近くでのほとんど垂直ともいえる急激な落ち込み(外方向へは，立ち上がり，訳者)に続いて深い極小をもち，それから上昇しはじめて漸近的にゼロに近づく．sおよびp状態の有効ポテンシャル・エネルギー曲線はその上昇する部分が互いに非常に近いところを通っている．このことはこれらの状態の電子が核からほぼ同じ距離にあることを意味している．dそしてとくにf状態の曲線はずっと左側に寄っている．すなわちこの曲線によって限られた古典的に許される領域は，同じくらいの全エネルギーをもつsやp状態よりもずっと内側で終わっている．いいかえれば，dおよびf状態の電子が主として滞在するのはsやp状態よりもずっと核に近いところである．

原子の多くの性質（その中には元素の化学的性質も含まれる——§81参照）は外側の領域の電子殻に主として依存している．この点できわめて重要なのがdおよびf殻の上記の特異性である．たとえば$4f$状態を埋めてゆく場合（希土類元素——以下参照)，加えられた電子はすでに満たされている状態の電子よりもずっと核に近いところを占有する．その結果これらの電子は化学的性質

にほとんど影響を与えない．したがって，すべての希土類元素は化学的にきわめて似通っている．

閉じたd殻とf殻をもつ（あるいは全くもたない）元素は**主族**の元素と呼ばれる．またこれらの状態の占有がちょうど進行しつつある元素は，**遷移（中間）族**の元素と呼ばれている．この2族の元素は別々に考察すると都合がよい．

主族の元素から始めよう．水素とヘリウムは次の基底状態をもっている：

$$_{1}\mathrm{H}:1s\ {}^{2}S_{1/2},\qquad {}_{2}\mathrm{He}:1s^{2}\ {}^{1}S_{0}$$

（化学記号の左腰に添数字があれば原子番号を示す）．主族の残りの元素の電子配置は第3表に示してある．

第3表　主族元素の電子配置

	s	s^2	s^2p	s^2p^2	s^2p^3	s^2p^4	s^2p^5	s^2p^6	
$n=2$	$_{3}$Li	$_{4}$Be	$_{5}$B	$_{6}$C	$_{7}$N	$_{8}$O	$_{9}$F	$_{10}$Ne	$1s^2$
3	$_{11}$Na	$_{12}$Mg	$_{13}$Al	$_{14}$Si	$_{15}$P	$_{16}$S	$_{17}$Cl	$_{18}$Ar	$2s^22p^6$
4	$_{19}$K	$_{20}$Ca							$3s^23p^6$
4	$_{29}$Cu	$_{30}$Zn	$_{31}$Ga	$_{32}$Ge	$_{33}$As	$_{34}$Se	$_{35}$Br	$_{36}$Kr	$3d^{10}$
5	$_{37}$Rb	$_{38}$Sr							$4s^24p^6$
5	$_{47}$Ag	$_{48}$Cd	$_{49}$In	$_{50}$Sn	$_{51}$Sb	$_{52}$Te	$_{53}$I	$_{54}$Xe	$4d^{10}$
6	$_{55}$Cs	$_{56}$Ba							$5s^25p^6$
6	$_{79}$Au	$_{80}$Hg	$_{81}$Tl	$_{82}$Pb	$_{83}$Bi	$_{84}$Po	$_{85}$At	$_{86}$Rn	$4f^{14}5d^{10}$
7	$_{87}$Fr	$_{88}$Ra							$6s^26p^6$
	${}^2S_{1/2}$	${}^1S_0$	${}^2P_{1/2}$	${}^3P_0$	${}^4S_{3/2}$	${}^3P_2$	${}^2P_{3/2}$	${}^1S_0$	

各原子にとってこの表の同じ行とそれより上の行の右端に示された殻は完全に埋められている．占有されつつある殻の電子配置は上方に示してある．またこの状態にある電子の主量子数は，この表の同じ行の左端にある数字によって示されている．下方には原子の全体としての基底状態が示してある．たとえば，Al 原子は電子配置 $1s^22s^22p^63s^23p\ {}^2P_{1/2}$ をもっている．

原子の基底状態におけるLとSの値は（電子配置がわかっていれば）フントの規則（§67）を用いて決めることができる．またJの値は§72に示した規則によって決められる．

希ガス原子（He，Ne，Ar，Kr，Xe，Rn）はこの表の中で特別な位置を占めている．このそれぞれのところで（73.1）に列挙した状態族の占有が完成し

ている．その電子配置は特別な安定性をもっている（イオン化ポテンシャルは対応する系列中の最高である）．これらの元素の化学的不活性はこのことと関係している．

主族の一連の元素では，異なる状態の占有は規則正しく行なわれていることがわかる．はじめは各主量子数 n の s 状態が，ついで p 状態が占有される．同様にこれら元素のイオンの電子配置も（イオン化の際に d 殻や f 殻の電子が冒されない限り）規則的である——各イオンはそれに先行する原子に対応する電子配置をもっている．たとえば Mg^{+} イオンは Na 原子の配置をもち，Mg^{++} イオンは Ne の配置をもっている．

つぎに遷移（中間）族の元素に進もう．$3d, 4d, 5d$ 殻の占有はそれぞれ**鉄族**，**パラジウム族**，**白金族**と呼ばれる元素族の中で進行する．第 4 表には分光学的実験データからわかったこれらの族の原子の電子配置と多重項を与えてある．この表からわかるように，d 殻の占有は主族元素の原子内の s 殻や p 殻の占有

第 4 表　鉄族，パラジウム族，白金族元素の原子の電子配置

鉄　　族

	$_{21}$Sc	$_{22}$Ti	$_{23}$V	$_{24}$Cr	$_{25}$Mn	$_{26}$Fe	$_{27}$Co	$_{28}$Ni
Ar 殻＋	$3d4s^2$ $^2D_{3/2}$	$3d^24s^2$ $^3F_2$	$3d^34s^2$ $^4F_{3/2}$	$3d^54s$ $^7S_3$	$3d^54s^2$ $^6S_{5/2}$	$3d^64s^2$ $^5D_4$	$3d^74s^2$ $^4F_{9/2}$	$3d^84s^2$ $^3F_4$

パラジウム族

	$_{39}$Y	$_{40}$Zr	$_{41}$Nb	$_{42}$Mo	$_{43}$Tc	$_{44}$Ru	$_{45}$Rh	$_{46}$Pd
Kr 殻＋	$4d5s^2$ $^2D_{3/2}$	$4d^25s^2$ $^3F_2$	$4d^45s$ $^6D_{1/2}$	$4d^55s$ $^7S_3$	$4d^55s^2$ $^6S_{5/2}$	$4d^75s$ $^5F_5$	$4d^85s$ $^4F_{9/2}$	$4d^{10}$ $^1S_0$

白　金　族

	$_{57}$La							
Xe 殻＋	$5d6s^2$ $^2D_{3/2}$							
	$_{71}$Lu	$_{72}$Hf	$_{73}$Ta	$_{74}$W	$_{75}$Re	$_{76}$Os	$_{77}$Ir	$_{78}$Pt
Xe 殻＋ $4f^{14}$＋	$5d6s^2$ $^2D_{3/2}$	$5d^26s^2$ $^3F_2$	$5d^36s^2$ $^4F_{3/2}$	$5d^46s^2$ $^5D_0$	$5d^56s^2$ $^6S_{5/2}$	$5d^66s^2$ $^5D_4$	$5d^76s^2$ $^4F_{9/2}$	$5d^96s$ $^3D_3$

よりはずっと不規則に進行する．ここで特徴的なことは s 状態と d 状態の間の《競争》である．これは p を増大する整数として，$d^p s^2$ 型の首尾一貫した規則的配置よりも，$d^{p+1}s$ あるいは d^{p+2} 型の配置の方がしばしば有利になる現象である．たとえば鉄族では Cr 原子は配置 $3d^5 4s$ をとり，$3d^4 4s^2$ にはならない．また 8 個の d 電子をもつ Ni の次には完全に閉じた d 殻をもつ Cu 原子がすぐ続く（それゆえわれわれはこれを主族に入れた）．このような規則性の欠除はイオンの多重項に関しても観測されている――イオンの電子配置はそれに先行する原子の配置とは一致しないのがふつうである．たとえば V^+ イオンは $3d^4$ 配置をもつ（Ti と同じ $3d^2 4s^2$ ではない）．Fe^+ イオンは（Mn 原子の $3d^5 4s^2$ 配置のかわりに）$3d^6 4s$ 配置をもつ，結晶や溶液の中に自然な形で見いだされるすべてのイオンはその不飽和殻に d 電子だけを含んでいる（s と p は含まない）ことを強調しておこう．たとえば鉄は結晶や溶液の中ではそれぞれ $3d^6$ および $3d^5$ 配置をもつ Fe^{++} および Fe^{+++} イオンの形でしか見いだされていない．

同じような事情は**希土類**という名前で知られる一連の元素の中で進行する $4f$ 殻の占有の際にも起こる（第 5 表）[1]．$4f$ 殻の占有は，$4f, 5d$ および $6s$ 状

第 5 表　希土類元素の原子の電子配置

Xe 殻＋	$_{58}$Ce	$_{59}$Pr	$_{60}$Nd	$_{61}$Pm	$_{62}$Sm	$_{63}$Eu	
	$4f5d6s^2$ $^1G_4$	$4f^3 6s^2$ $^4I_{9/2}$	$4f^4 6s^2$ $^5I_4$	$4f^5 6s^2$ $^6H_{5/2}$	$4f^6 6s^2$ $^7F_0$	$4f^7 6s^2$ $^8S_{7/2}$	
	$_{64}$Gd	$_{65}$Tb	$_{66}$Dy	$_{67}$Ho	$_{68}$Er	$_{69}$Tu	$_{70}$Yb
	$4f^7 5d6s^2$ $^9D_2$	$4f^9 6s^2$ $^6H_{15/2}$	$4f^{10} 6s^2$ $^5I_8$	$4f^{11} 6s^2$ $^4I_{15/2}$	$4f^{12} 6s^2$ $^3H_6$	$4f^{13} 6s^2$ $^2F_{7/2}$	$4f^{14} 6s^2$ $^1S_0$

第 6 表　アクチニド族の原子の電子配置

Rn 殻＋	$_{89}$Ac	$_{90}$Th	$_{91}$Pa	$_{92}$U	$_{93}$Np	$_{94}$Pu	$_{95}$Am	$_{96}$Cm
	$6d7s^2$ $^2D_{3/2}$	$6d^2 7s^2$ $^3F_2$	$5f^2 6d7s^2$ $^4K_{11/2}$	$5f^3 6d7s^2$ $^5L_6$	$5f^4 6d7s^2$ $^6L_{11/2}$	$5f^6 7s^2$ $^7F_0$	$5f^7 7s^2$ $^8S_{7/2}$	$5f^7 6d7s^2$ $^9D_2$

1）化学の教科書では Lu も希土類に入れるのがふつうである．しかしこれは正しくない．なぜならばその $4f$ 殻はすでに飽和しているからである．Lu は第 4 表のように当然白金族に入れるべきである．

態間の《競争》を反映して完全には規則的でない方法によって行なわれる.

元素の最後の遷移族はアクチニウムから始まる. この族では希土類元素の列の占有と類似した $6d$ と $5f$ 殻の占有が進行する (第6表).

この節を終わるに当たってトーマス=フェルミの方法の一つの興味ある応用について述べよう. すでに見てきたように, p 殻に電子が初めてあらわれるのは5番目の元素 (B) である. d 電子は $Z=21$ (Sc) からあらわれる. また f 電子は $Z=58$ (Ce) からあらわれる. これらの Z の値は次のようにトーマス=フェルミの方法を用いて予言することができる.

複雑な原子内で軌道角運動量 l をもつ電子は

$$U_l(r)=-\varphi(r)+\frac{(l+1/2)^2}{2r^2}$$

に等しい《有効ポテンシャル・エネルギー》の中を運動する[1]. 第1項はトーマス=フェルミのポテンシャル $\varphi(r)$ で記述される電場中のポテンシャル・エネルギーである. 第2項は遠心エネルギーである. 運動は準古典的なので, この中で $l(l+1)$ のかわりに $(l+1/2)^2$ と書いた. 原子内の電子の全エネルギーは負なので, (Z と l を与えたとき) もしもすべての r に対して $U_l(r)>0$ ならば, 考えている角運動量の値 l をもつ電子は一般にこの原子内には存在できない. 任意の確定値 l を考え, Z を変化させよう, Z が十分に小さくなると実際にいたるところで $U_l(r)>0$ となることがわかる. Z を増していくと, 曲線 $U_l=U_l(r)$ が横軸に接する瞬間がくる. そしてそれより大きな Z では $U_l(r)<0$ となる領域が存在する. したがって原子内に一定の l をもつ電子が出現する瞬間は, 曲線 $U_l(r)$ が横軸に接するという条件から, すなわち方程式

$$U_l(r)=-\varphi+\frac{(l+1/2)^2}{2r^2}=0, \qquad U_l'(r)=-\varphi'(r)-\frac{(l+1/2)^2}{r^3}=0$$

によって決定される.

ここにポテンシャルの式 (70.6) を代入すれば, 次式が得られる:

$$\begin{aligned} Z^{2/3}\frac{\chi(x)}{x}&=\left(\frac{4}{3\pi}\right)^{2/3}\frac{(l+1/2)^2}{x^2}, \\ Z^{2/3}\frac{x\chi'(x)-\chi(x)}{x}&=-2\left(\frac{4}{3\pi}\right)^{2/3}\frac{(l+1/2)^2}{x^2}. \end{aligned} \tag{73.2}$$

---

1) §70と同様に原子単位を採用する.

この第2の方程式を第1の方程式で辺々割れば，xに対して次の方程式が得られる：

$$\frac{\chi'(x)}{\chi(x)}=-\frac{1}{x}.$$

つぎに（73.2）の第1の方程式によってZを計算する．数値計算は

$$Z=0.155(2l+1)^3$$

を与える．この公式は与えられたlをもつ電子がはじめて原子内に出現するZの値を定めている（誤差は約10%）．

もしも係数0.155のかわりに0.17をとれば，きわめて正確な値が得られる：

$$Z=0.17(2l+1)^3. \qquad (73.3)$$

この公式を四捨五入してもっとも近い整数をとることにすれば$l=1,2,3$に対してちょうど正しい値5, 21, 58がえられる．$l=4$に対しては公式（73.3）は$Z=124$を与える．これはg電子は124番目の元素になってはじめてあらわれるであろうことを示している．

§ 74. X　線　項

原子の内殻電子の結合エネルギーは非常に大きいので，もしもこのような電子が不飽和外殻に遷移すると（あるいは一般には，その原子からとり去られると），励起された原子（あるいはイオン）はイオン化に関して力学的に不安定になり，それに伴って電子殻の再編成と安定イオンの形成が誘起される．しかし原子内の電子間相互作用は比較的小さいので，このような遷移の確率は比較的小さく，したがって励起状態の寿命τは長い．それゆえ準位の《幅》$\hbar/\tau$（§44参照）は十分に狭く，そのため励起された内殻電子をもつ原子のエネルギーを，原子の《準定常》状態の離散的エネルギー準位と考えることができる．このような準位は**X線項**と呼ばれている[1]．

X線項はまずはじめに電子がとり去られた殻，あるいはいわゆる《空孔》のできた殻を指定することによって分類される．このときその電子がどこへ入ったかということは原子のエネルギーにほとんど反映しないため重要でない．

ある殻を飽和している電子集団の全角運動量はゼロに等しい．これから電子

1）この名前はこれらの準位間の遷移がその原子からX線の放出をもたらす事実に由来する．

を1個とり去れば，殻はある角運動量 j を得る．(n, l) 殻では明らかに角運動量 j は値 $l\pm1/2$ をとることができる．したがって $1s_{1/2}, 2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}, \cdots$ によってあらわされる準位を得る．ここで j の値は《空孔》の所在を示す記号に添字の形で付記してある．しかし次のような対応関係にある特殊記号の使用が一般には行なわれている：

$$\begin{array}{cccccccccc} 1s_{1/2}, & 2s_{1/2}, & 2p_{1/2}, & 2p_{3/2}, & 3s_{1/2}, & 3p_{1/2}, & 3p_{3/2}, & 3d_{3/2}, & 3d_{5/2}, & \cdots \\ K & L_{\mathrm{I}} & L_{\mathrm{II}} & L_{\mathrm{III}} & M_{\mathrm{I}} & M_{\mathrm{II}} & M_{\mathrm{III}} & M_{\mathrm{IV}} & M_{\mathrm{V}} & \cdots \end{array}$$

また同じように，$n=4, 5, 6$ の準位は文字 N, O, P によってあらわされる．

同じ n をもつ（同じ大文字であらわされる）準位は互いに近い位置に，また異なる n をもつ準位は離れた位置にある．この原因は内殻電子が比較的核に近いため，ほとんど遮蔽されて（さえぎられて）いない核の場の中にあるためである．したがってその状態は水素型となり，そのエネルギーは1次近似では $-Z^2/2n^2$（原子単位）に等しい．すなわち n だけに依存するようになる．

相対論的効果を考えると，異なる j をもつ項の間に分離が起きる（§72で述べた水素の準位の微細構造のところを参照）．たとえば L_{I} と L_{II} が L_{III} から，M_{I} と M_{II} が M_{III} と M_{IV} から分離する．これらの準位の対は**相対論的2重項**と呼ばれている．

j は同じで l の異なる項（たとえば L_{I} と L_{II}，M_{I} と M_{II}）の間の差は，内殻電子の感ずる場が核のクーロン場からはずれていること，すなわちその電子と他の電子の相互作用を考慮することと関連している．このような2重項のことを**遮蔽2重項**という．電子の《水素型》エネルギーに対する主な補正項は，核に近い領域にある残りの電子のつくるポテンシャルから生まれる．これは $Z^{4/3}$ に比例する（(70.8) 参照）．しかしこの補正は n にも l にも依存しないので，これは準位の間隔には反映しない．それゆえ準位の差に対する主な補正項は一つの電子とそれにもっとも近い電子との相互作用から生ずる．内殻電子間の距離は $r\sim1/Z$（電荷 Z の場の中のボーア半径）であるから，上述の相互作用のエネルギーは $\sim1/r\sim Z$ である．この補正を考慮すると，X線項のエネルギーは同じ精度で $-(Z-\delta)^2/2n^2$ という形に書くことができる．ここで $\delta=\delta(n, l)$ は（Z に比べて）小さな量であり，核電荷のさえぎりの目安と考えることができる．

電子殻に1個の《空孔》をもつX線項とともに，2個，3個の空孔をもつ項もあり得る．内殻電子ではスピン-軌道相互作用が強いので，空孔相互の結合は jj 結合方式に従って行なわれる．

X線項の幅は原子の電子殻にできた空孔を埋めるすべての可能な再編成過程の確率の和によって決められる．重い原子ではこのとき，X線量子の放射を伴なうある殻からより高い殻への空孔の遷移（すなわち電子のこれと逆の遷移）が重要な役割を果たしている．この《輻射》遷移の確率，およびそれに対応する準位の幅は，原子番号が増えると急激に——Z^4 のように——増大するが，（Z が一定の場合には）深い準位から浅い準位へと順次減少する．

もっと軽い原子（またはもっと高い準位）では，より高いエネルギーの電子が空孔を埋めるときに解放されるエネルギーを利用して他の内殻電子が原子から飛び出す無輻射遷移（いわゆる**オージェ効果**）が重要となり，場合によっては圧倒的に効いてくる．この過程の結果，原子は二つの空孔をもつ状態に残される．これらの過程の確率と，それに対応する準位幅への寄与は，（$1/Z$ についての）第1近似では原子番号に依存しない（問題参照）[1]．

問　　題

原子番号が十分大きい極限の場合に，X線項のオージェ幅の原子番号への依存性の規則を求めよ．

解　オージェ過程の確率は次の形の行列要素の自乗に比例する：

$$M=\iint\psi_1'^*\psi_2'^*V\psi_1\psi_2dV_1dV_2.$$

ここで ψ_1, ψ_2 および ψ_1', ψ_2' は遷移に関与する二つの電子のはじめとおわりの波動関数である．また $V=e^2/r_{12}$ はその相互作用である．Z が十分に大きい場合には，内殻電子の波動関数を水素型と考えて，他の電子による核の場のさえぎりを無視できる（また積分 M にとって重要な原子の内奥の領域では，イオン化される電子の波動関数も水素型である）．すべての量を（定数 $\alpha=Ze^2$ をもつ）クーロン単位（§36参照）であらわして計算を行なうことにすると，積分 M の中の Z に依存する唯一の量は $V=1/Zr_{12}$ である．したがって $M\sim1/Z$ である．遷移確率とそれによる準位のオージェ幅 ΔE は Z^{-2} に比例する．通常単位に戻ると，ΔE は Z に依存しないことがわかる（エネルギーのクーロン単位は $Z^2me^4/\hbar^2$ である）．

1)　一例として挙げれば，K 準位のオージェ幅は約1 eVであるが，もっと高い準位では ~10 eV という値にも達する．

§ 75. 多重極モーメント

よく知られているように，古典論では粒子系の電気的性質は粒子の電荷と座標によってあらわされる種々の次数の多重極モーメントで記述される．量子論でもこの量の定義はそのままの形で保存されるが，これを演算子と考えなくてはならない．

多重極モーメントの第1はベクトル

$$\boldsymbol{d}=\sum e\boldsymbol{r}$$

として定義される**双極モーメント**である（和は体系の中のすべての粒子について行なわれる．粒子につける番号は簡単のために省いた）．この演算子の行列は——すべての極性ベクトルと同じように（§30参照）——異なる偶奇性の状態間の遷移に対してだけゼロでない要素をもつ．それゆえすべての対角要素はあらゆる場合にゼロである．いいかえれば，定常状態にある任意の粒子系（たとえば原子）の双極モーメントの平均値はゼロに等しい[1]．

明らかにこれと同じことが奇数の l をもつすべての 2^l 重極モーメントについて一般に成り立つ；このようなモーメントの成分は座標について奇数次（l 次）の多項式であらわされ，これは極性ベクトルの成分と同じように座標反転によって符号を変える．それゆえこれらでは偶奇性に関して同じ選択則が成り立っている．

系の**4重極モーメント**は，対角項の和がゼロの対称テンソル

$$Q_{ik}=\sum e(3x_ix_k-\delta_{ik}r^2) \tag{75.1}$$

で定義される．系（たとえば原子）のある状態におけるこの量の値を求めるためには，演算子（75.1）を対応する波動関数で平均する必要がある．この平均は2段階に分けて行なうのが目的に適ったやり方である（§72参照）．

全角運動量 J が一定の（だがその投影 M_J は決まっていない）電子状態で平均した4重極モーメントの演算子を $\hat{Q}_{ik}$ であらわそう．

1) 誤解を避けるために強調しておくが，ここで問題にしているのは閉じた粒子系，あるいは中心対称の外部電場の中の粒子系である．したがって核を《固定されたもの》と考えるならば，ここで導かれた一般的命題は原子の電子系については正しいが，分子については正しくない．

　また全角運動量の方向に関する縮退以外には，エネルギー準位に余分の（《偶然》）縮退はないと仮定している．さもないと，確定した偶奇性をもたない定常状態の波動関数をつくることができて，それに対応する双極モーメントの対角要素はゼロになる必要がなくなる．

このようにして平均された演算子は，原子の状態を一括して指定する量の演算子だけで表わすことが可能である．唯一のこのようなベクトルは $\hat{\boldsymbol{J}}$《ベクトル》である．それゆえ，演算子 $\hat{Q}_{ik}$ は次の形をとらなければならない．

$$\hat{Q}_{ik}=\frac{3Q}{2J(2J-1)}\left(\hat{J}_i\hat{J}_k+\hat{J}_k\hat{J}_i-\frac{2}{3}\hat{\boldsymbol{J}}^2\delta_{ik}\right), \tag{75.2}$$

ここで，括弧の中の表式は，添字 i，k について対称となるように，またこの一対の添字について縮約するとゼロになるように組み立てた（係数 Q の意味については，以下参照）．ここの演算子 $\hat{J}_i$ は，すでにわれわれの知っているもので（§27, §54），いろいろな M_J の値をもった状態に関する行列である．演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ は，もちろん，その固有値 $J(J+1)$ で簡単に置きかえることができる．

角運動量 $\boldsymbol{J}$ の3成分は同時に確定値をとることができないから，テンソル成分 Q_{ik} についても同じことが起こる．成分 Q_{zz} に対する演算子は

$$\hat{Q}_{zz}=\frac{3Q}{J(2J-1)}\left(\hat{J}_z^2-\frac{1}{3}\hat{\boldsymbol{J}}^2\right)$$

である．確定値 $\boldsymbol{J}^2=J(J+1)$ と $J_z=M_J$ をとる状態では，Q_{zz} も次の確定値をとる：

$$Q_{zz}=\frac{3Q}{J(2J-1)}\left[M_J^2-\frac{1}{3}J(J+1)\right]. \tag{75.3}$$

$M_J=J$ の場合（角運動量が《まっすぐ》z 軸を向いている場合），$Q_{zz}=Q$ となる．この量のことをふつう簡単に4重極モーメントと呼んでいる．

$J=0$ の場合は，角運動量の行列のすべての要素はゼロに等しい，したがって，演算子（75.2）も消えてしまう．この演算子は $J=1/2$ の場合にも恒等的にゼロになる．大きさが1/2に等しいあらゆる角運動量成分の行列を表わすパウリの行列（55.7）を直接掛け合せることによって，このことは容易に確めることができる．

この事情は偶然ではなく，むしろ，次のような一般規則の特別な場合にあたっている．すなわち，2^l 重極モーメント（l は偶数）がゼロにならないのは，系の状態が，次のような全角運動量

$$J\geqslant l/2 \tag{75.4}$$

をもつ場合に限られる．2^l 重極モーメント・テンソルは階数 l の既約テンソルである（第II巻『場の古典論』§41参照）．そして，条件（75.4）は，このよ

うなテンソルの行列要素の角運動量状態に関する一般的選択則からの帰結である．これは，対角行列要素がゼロにならないための条件である（§107）．すでに上に述べたように，偶奇性に関する選択則からは，l が偶数であることが要求される．

また，電気多重極モーメントが純粋に《軌道的な》量である（その演算子はスピン演算子を含まない）ことも考慮に入れるべきことである．したがって，もしもスピン-軌道相互作用が無視できて，L と S が別々に保存されるならば，多重極モーメントの行列要素は，量子数 J に関する選択則のみでなく，L に関する選択則にもしたがうことになる．

問　題

1. 準位の微細構造のいろいろな成分に対応する状態（すなわち L と S が一定で，J がいろいろな値をとる状態）にある原子の 4 重極モーメント演算子の間の関係を求めよ．

解 L と S の値が一定の状態では，純粋な《軌道的な》量である 4 重極モーメント演算子は演算子 $\hat{\boldsymbol{L}}$ のみに依存し，したがって (75.2) で $\hat{\boldsymbol{J}}$ を $\hat{\boldsymbol{L}}$ に置きかえただけの同じ公式によってあらわされる（ただし定数 Q は異なる）．演算子 (75.2) は，これを J が一定の状態でさらに平均することによって得られる：

$$\hat{Q}_{ik}=\frac{3Q_J}{2J(2J-1)}\left[\hat{J}_i\hat{J}_k+\hat{J}_k\hat{J}_i-\frac{2}{3}J(J+1)\delta_{ik}\right]$$
$$=\frac{3Q_L}{2L(2L-1)}\left[\overline{\hat{L}_i\hat{L}_k}+\overline{\hat{L}_k\hat{L}_i}-\frac{2}{3}L(L+1)\delta_{ik}\right]. \qquad (1)$$

係数 Q_J と Q_L の間の関係を求める必要がある．そのために等式 (1) の左から $\hat{J}_i$ を，右から $\hat{J}_k$ を掛ける（i と k について和をとる）．そして対角演算子の固有値に移ろう．このとき

$$\hat{J}_i\hat{L}_i\hat{L}_k\hat{J}_k=(\boldsymbol{JL})^2$$

となる．ここで公式 (31.4) によって

$$2\boldsymbol{JL}=J(J+1)+L(L+1)-S(S+1)$$

である．積 $\hat{J}_i\hat{L}_k\hat{L}_i\hat{J}_k$ の方は公式

$$\{\hat{L}_i,\hat{L}_k\}=ie_{ikl}\hat{L}_l,\qquad \{\hat{J}_i,\hat{L}_l\}=ie_{ilm}\hat{L}_m$$

を用いて§29の問題 2 の中で行なったのと同じように変形する．すると次式が得られる：

$$\hat{J}_i\hat{L}_k\hat{L}_i\hat{J}_k=(\boldsymbol{JL})^2-(\boldsymbol{JL}).$$

同様にして

$$\hat{J}_i\hat{J}_i\hat{J}_k\hat{J}_k=(\boldsymbol{J}^2)^2,\qquad \hat{J}_i\hat{J}_k\hat{J}_i\hat{J}_k=\boldsymbol{J}^2(\boldsymbol{J}^2-1)$$

となる．その結果，(1) より次の関係式が得られる：

$$Q_J = Q_L \frac{3(\boldsymbol{JL})(2\boldsymbol{JL}-1)-2J(J+1)L(L+1)}{(J+1)(2J+3)L(2L-1)}. \tag{2}$$

とくに $S=1/2$ のときには，この公式から

$$\begin{aligned} &J=L+\frac{1}{2} \quad \text{ならば} \quad Q_J=Q_L \\ &J=L-\frac{1}{2} \quad \text{ならば} \quad Q_J=Q_L\frac{(L-1)(2L+3)}{L(2L+1)} \end{aligned} \tag{3}$$

となる.

2.　軌道角運動量 l をもつ電子（電荷は $-|e|$）の4重極モーメントを，中心までの電子の距離の自乗の平均であらわせ.

解　与えられた角運動量 l と角運動量の投影 $m=l$ をもつ状態について次式を平均しなければならない：

$$Q_{zz} = -|e|r^2(3\cos^2\theta-1) = -|e|r^2(3n_z^2-1).$$

角度因子の平均値は§29の問題で求めた公式から直接に決められる（ただしその中で $\hat{l}_z$ を l に置きかえなければならない）. その結果次式が得られる：

$$Q_l = |e|\overline{r^2}\frac{2l}{2l+3}. \tag{4}$$

この量の符号は電子の電荷の符号とは逆であるが，これはむしろ当然である，なぜならば角運動量が z 軸を向いて運動する粒子は主として平面 $z=0$ の付近にあり，そのため $\overline{\cos^2\theta}<1/3$ となるからである.

確定値 $j=l\pm1/2$ をもつ電子に対しては，公式（3）を用いて書き直すと，次のように与えられる：

$$Q_j = |e|\overline{r^2}\frac{2j-1}{2j+2}. \tag{5}$$

3.　閉殻より外側に軌道角運動量が l の等価な状態にぜんぶで ν 個の電子がつめられているとき，（基底状態の）原子の4重極モーメントを求めよ.

解　閉殻の全4重極モーメントはゼロであるから，原子の4重極モーメント演算子は ν 個の外殻電子についての和

$$\hat{Q}_{ik} = \frac{3|e|\overline{r^2}}{(2l-1)(2l+3)}\sum\left[\hat{l}_i\hat{l}_k+\hat{l}_k\hat{l}_i-\frac{2}{3}l(l+1)\delta_{ik}\right]$$

である（ここで公式（4）を用いた).

はじめは $\nu\leqq 2l+1$ とする. すなわち殻の席は半分あるいはそれ以下しか占有されていないと仮定する. そのときにはフントの規則（§67）によって，すべての ν 個の電子のスピンは平行（したがって $S=\nu/2$）である. これは原子のスピン波動関数がこれらの電子について対称，したがって軌道波動関数は反対称であることを意味している. したがってすべての電子は異なる m の値をもたなければならない. それゆえ許される最大の M_L の値（とそれに一致する L の値）は

$$L=(M_L)_{\max}=\sum_{m=l-\nu+1}^{l} m=\frac{1}{2}\nu(2l-\nu+1)$$

に等しい．

求める Q_L は $M_L=L$ のときの固有値 Q_{zz} である．それゆえ

$$Q_L=\frac{6|e|\overline{r^2}}{(2l-1)(2l+3)}\sum_{m=l-\nu+1}^{l}\left[m^2-\frac{l(l+1)}{3}\right]$$

を得る．和の計算をすれば，これから

$$Q_L=\frac{2l(2l-2\nu+1)}{(2l-1)(2l+3)}|e|\overline{r^2} \tag{6}$$

となる．最後の Q_L から Q_J への移行は公式 (2) によって行なわれる．

外殻が半分以上占有されている原子の場合は，電子のかわりに空孔を考えれば前の場合に還元される．それゆえ答は全体の符号を変えた (6) と同様の公式で与えられる（《空孔》の電荷は $+|e|$ に等しい）．またこの場合 ν を電子の数でなく，殻中の空席の数と考えなければならない．

§ 76. 電場の中の原子

原子を外部電場の中に置くと，そのエネルギー準位は変化する．この現象を**シュタルク効果**という．

一様な外部電場の中に置かれた原子の中で，われわれの問題となるのは軸対称の場（核の場と外場の和）の中にある電子系である．それゆえ原子の全角運動量は厳密には保存しなくなる．保存するのは全角運動量 $\boldsymbol{J}$ のこの場の方向への投影 M_J だけである．異なる M_J の値をもつ状態は異なるエネルギーをもつであろう．すなわち電場は角運動量の方向に関する縮退をとり除く．しかしこの縮退のとれ方は完全ではない．M_J の符号だけが異なる状態は依然として互いに縮退したままである．実際，一様な外部電場の中の原子は対称軸（核を通り場の方向を向いた軸，以下ではこれを z 軸に選ぶ）を含む任意の面による鏡映に関して対称である．したがって，このような鏡映によって互いに移り変わる状態は同一のエネルギーをもたなければならない．ところがある軸を含む平面による鏡映を行なえば，この軸の回りの角運動量はその符号を変える（この軸のまわりの右回りの回転は左回りに変わる）．

電場は十分に弱くて，それによって生ずる付加的エネルギーは微細構造を含めた原子の隣接するエネルギー準位の間隔よりも小さいと仮定しよう．そのときには電場の中での準位の変移を計算するために § 38，§ 39 で展開した摂動論

を用いることができる．このとき摂動演算子となるのは，一様な場 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ の中の電子系のエネルギーである．これは

$$V = -\boldsymbol{d}\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\mathcal{E}d_z \tag{76.1}$$

に等しい．ここで $\boldsymbol{d}$ は系の双極モーメントである．ゼロ次近似ではエネルギーは（全角運動量の方向に関して）縮退している．しかしいまの場合はこの縮退は重要ではない．そして摂動論を適用する場合にも，あたかも非縮退準位を扱うようにすればよい．これは量 d_z の行列要素のうちでゼロにならないのは（他のあらゆるベクトルの z 成分と同様に）M_J を変えない遷移に対するものだけであって（§29参照），したがって M_J の値の異なる状態は，摂動論を適用しても互いに独立に振舞うためである．

1次近似における エネルギー 準位の変移は，摂動のしかるべき 対角行列要素によって決められる．しかし双極モーメントの対角行列要素は恒等的にゼロである（§75）．したがって電場の中での準位の分裂は場について2次の効果である[1]．その計算は摂動論の一般規則に従って行なわなければならないが，準位の変移の量子数 M_J への依存性は，より一般的な考察から定めることができる．

準位 E_n の変移 ΔE_n は，電場について2次の量であるから，次のような式であらわされるはずである：

$$\Delta E_n = -\frac{1}{2}\alpha_{ik}^{(n)}\mathcal{E}_i\mathcal{E}_k. \tag{76.2}$$

ここで $\alpha_{ik}^{(n)}$ は対称テンソルである．z 軸を場の方向に選ぶと

$$\Delta E_n = -\frac{1}{2}\alpha_{zz}^{(n)}\mathcal{E}^2 \tag{76.3}$$

が得られる．

またテンソル $\alpha_{ik}^{(n)}$ は，外部電場の中の原子の**分極率**でもある．実際，一般公式（11.16）の中で，パラメータ λ をベクトル成分 $\mathcal{E}_i$ と考えて，$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mathcal{E}_i d_i$ と置けば，場によって誘起される原子の双極モーメントは

1）水素原子は例外である．この場合はシュタルク効果は電場について1次である（次節参照）．強く励起された状態（したがって水素型の状態，§68参照）にある他の元素の原子も，十分に強い電場の中では水素と似た振舞いをする．

$$\bar{d}_i^{(n)}=\frac{\partial \Delta E_n}{\partial \mathscr{E}_i}$$

であることがわかる．ここに（76.2）を代入すると，

$$\bar{d}_i^{(n)}=\alpha_{ik}^{(n)}\mathscr{E}_k \tag{76.4}$$

がえられる．

分極率の計算は摂動論の一般規則にしたがって行なわれる．2次近似の公式（38.10）によって，次式がえられる：

$$\alpha_{ik}^{(n)}=-2\sum_m{}'\frac{(d_i)_{nm}(d_k)_{mn}}{E_n-E_m}. \tag{76.5}$$

原子の分極率は，原子の（非摂動）状態に，なかでも量子数 M_J に依存している．この M_J への依存性は一般的な形に定式化することができる．異なる M_J の値に対応する $\alpha_{ik}^{(n)}$ の値は，次のような演算子の固有値と考えることができる：

$$\hat{\alpha}_{ik}^{(n)}=\alpha_n\delta_{ik}+\beta_n\left(\hat{J}_i\hat{J}_k+\hat{J}_k\hat{J}_i-\frac{2}{3}\delta_{ik}\hat{\boldsymbol{J}}^2\right). \tag{76.6}$$

これはベクトル $\hat{\boldsymbol{J}}$ に依存する2階の対称テンソルの一般形である（§75参照）．（76.3）と（76.6）から次式がえられる：

$$\Delta E_n=-\frac{\mathscr{E}^2}{2}\left\{\alpha_n+2\beta_n\left[M_J^2-\frac{1}{3}J(J+1)\right]\right\}. \tag{76.7}$$

M_J のすべての値について和をとると，波括弧の中の第2項はゼロになる．したがって，第1項は分裂した準位に共通な《重心》の変移である．また，（76.7）によれば，$J=1/2$ の準位は分裂せずに残ることに注意しよう．これはクラマースの定理（§60）の言う通りである．

もしも原子が一様でない（原子の大きさの範囲でわずかに変化する）外場の中に置かれていれば，原子の4重極モーメントに関係した，電場について1次の分裂効果も起こり得る．系と電場との4重極相互作用の演算子は，4重極エネルギーの古典的表式（第Ⅱ巻『場の古典論』§42参照）に対応して次の形になる：

$$\hat{V}=\frac{1}{6}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_i\partial x_k}\hat{Q}_{ik}. \tag{76.8}$$

ここで φ は電場のポテンシャルである（当然，微係数は原子の位置の値をとる）．

問　題

1. 多重項準位のいろいろな成分のシュタルク分裂の J への依存性を求めよ.

解 摂動を加える順序を変えるとこの問題はうまく解ける. すなわちまずはじめに微細構造のない準位のシュタルク分裂を考え，それからスピン-軌道相互作用を導入する. 原子のスピンは外部電場と相互作用しないので，一定の軌道角運動量 L をもつ準位のシュタルク分裂は，(76.6) が $\hat{J}$ で表わされているように演算子 $\hat{L}$ で表わされているテンソル：

$$\hat{\alpha}_{ik}=a\delta_{ik}+b\left(\hat{L}_i\hat{L}_k+\hat{L}_k\hat{L}_i-\frac{2}{3}\delta_{ik}\hat{L}^2\right)$$

（ここで添字 n はすべて落とした）を用いた(76.2)と同型の公式によって決定される. スピン-軌道相互作用を導入した後には，原子の状態は，全角運動量 J によって指定されなければならない. 角運動量の値 J が与えられている（ただしその投影 M_J は与えられていない）状態における演算子 $\hat{\alpha}_{ik}$ の平均は，§75 の問題 1 で行なった平均と形式的に同じである. その結果われわれは，公式 (76.6), (76.7) に戻るが，この中の定数 α, β は次の関係によって定数 a, b と結ばれている：

$$\alpha=a,\qquad \beta=b\frac{3(\boldsymbol{JL})[2(\boldsymbol{JL})-1]-2J(J+1)L(L+1)}{J(J+1)(2J-1)(2J+3)}.$$

これによって分裂の J への依存性は決まった（しかし当然ながら L と S に対する依存性は決まらない. 定数 a, b は未分裂項を指定する他の量とともに L と S にも依存するからである).

2. 任意の（弱くない）電場の中での 2 重項（スピン $S=1/2$）の準位の分裂を求めよ.

解 もしも分裂の大きさが 2 重項の成分の間隔に比べて小さくなければ，電場からの摂動とスピン-軌道相互作用は同時に考慮しなければならない. すなわち摂動演算子は和

$$\hat{V}=A\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{L}}-\frac{1}{2}\mathscr{E}^2\left\{a+2b\left[\hat{L}_z^2-\frac{1}{3}L(L+1)\right]\right\}$$

となる（(72.4) および前問参照). 準位の分裂にとって重要でない定数項を落として，この演算子を次の形に書きかえよう（(29.11) 参照)：

$$\hat{V}=\frac{A}{2}[\hat{S}_+\hat{L}_-+\hat{S}_-\hat{L}_++2\hat{S}_z\hat{L}_z]-b\mathscr{E}^2\hat{L}_z^2.$$

$M\equiv M_J$ の値が与えられたとき，この演算子の固有値は，状態 $|M_L, M_S\rangle=|M\mp1/2, \pm1/2\rangle$ に関する行列要素からつくられる永年方程式の根によって決められる. 公式 (27.12) を用いると次の式が得られる：

$$\langle M-1/2, 1/2|V|M-1/2, 1/2\rangle=\frac{A}{2}\left(M-\frac{1}{2}\right)-b\mathscr{E}^2\left(M-\frac{1}{2}\right)^2,$$

$$\langle M+1/2, -1/2|V|M+1/2, -1/2\rangle=-\frac{A}{2}\left(M+\frac{1}{2}\right)-b\mathscr{E}^2\left(M+\frac{1}{2}\right)^2,$$

$$\langle M-1/2, 1/2|V|M+1/2, -1/2\rangle=\frac{A}{2}\left[\left(L+M+\frac{1}{2}\right)\left(L-M+\frac{1}{2}\right)\right]^{1/2}.$$

その結果準位の変移として次式が得られる（§ 39，問題 1 参照）：

$$\Delta E=-b\mathcal{E}^2M^2\pm\sqrt{\frac{A^2}{4}\left(L+\frac{1}{2}\right)^2+b\mathcal{E}^2(b\mathcal{E}^2+A)M^2}. \qquad (1)$$

ここで分裂した 2 重項のすべての成分に共通な項は全部落とした．この公式は（根号の前の二つの符号を含めて）$|M|\leqq L-1/2$ なるすべての準位に適用できる．$|M|=L+1/2$ という値には，ただ一つの状態 $|M_LM_S\rangle$ が対応し，準位の変移は，簡単にしかるべき対角行列要素によって与えれる．(1) と同じように付加定数を選ぶと，

$$\Delta E=\left(\frac{A}{2}+b\mathcal{E}^2\right)\left(L+\frac{1}{2}\right)-b\mathcal{E}^2\left(L+\frac{1}{2}\right)^2 \qquad (2)$$

がえられる（これは公式 (1) で根号の前の符号を片方だけにして得られる結果と一致する）．

3.　軸対称の電場の中での準位の 4 重極分裂を求めよ[1]．

解　z 軸の回りに対称な場の中では

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}=\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\equiv a, \qquad \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=-2a$$

となり，その他の 2 次の微係数はゼロである．4 重極エネルギーの演算子 (76.8) は次の形をとる：

$$\frac{a}{6}(\hat{Q}_{xx}+\hat{Q}_{yy}-2\hat{Q}_{zz})=\frac{Qa}{2J(2J-1)}(\hat{J}^2-3\hat{J}_z^2).$$

演算子をその固有値で置きかえると，準位の変移として次の式が得られる：

$$\Delta E=a\frac{Q}{2J(2J-1)}[J(J+1)-3M_J^2].$$

4.　基底状態にある水素原子の分極率を計算せよ．

解　s 状態の球対称性のために，分極率テンソルはスカラー ($\alpha_{ik}=\alpha\delta_{ik}$) となり，(76.5) によって次のように与えられる：

$$\alpha=-2e^2\sum_k{}'\frac{|z_{0k}|^2}{E_0-E_k}$$

（電子の双極モーメントは $d_z=ez$；E_0 は基底エネルギー準位）．次の定義によって補助演算子 $\hat{b}$ を導入しよう：

$$z=\frac{m}{\hbar}\frac{d\hat{b}}{dt}$$

(m は電子の質量)．そうすると，$z_{0k}=(im/\hbar^2)(E_0-E_k)b_{0k}$ となり，これから

$$\alpha=\frac{2ime^2}{\hbar^2}\sum_k z_{0k}b_{k0}=\frac{2ime^2}{\hbar^2}(z\hat{b})_{00} \qquad (1)$$

がえられる．この量を計算するためには，$\hat{b}$ を波動関数 $\psi_0(r)$ に作用させた結果を知れば十分である．

(9.2) から，

1) 任意の場に対する類似の問題については，§ 103 問題 6 参照．

$$z\psi_0=\frac{m}{\hbar}\frac{d\hat{b}}{dt}\psi_0=\frac{im}{\hbar}(\hat{H}\hat{b}-\hat{b}\hat{H})\psi_0$$

がえられる．関数 $\hat{b}\psi_0$ を $b(\boldsymbol{r})\psi_0$ のように書き，またハミルトニアンを $\hat{H}=-\hbar^2\triangle/2m+U(\boldsymbol{r})$ として，ψ_0 は方程式 $\hat{H}\psi_0=E_0\psi_0$ をみたすことを考慮すれば，$b(\boldsymbol{r})$ に対して次の微分方程式がえられる

$$\frac{1}{2}\psi_0\triangle b+\nabla b\,\nabla\psi_0=iz\psi_0.$$

$b=\cos\theta f(r)$ と置き換えると（ここで，θ は球座標における極角，$z=r\cos\theta$），この方程式は次の形になる：

$$\frac{f''}{2}+\frac{f'}{r}-\frac{f}{r^2}+\frac{\psi_0'}{\psi_0}f'=ir. \qquad (2)$$

この方程式の解は，$f\psi_0$ が $r\to0$ および $r\to\infty$ において有限という条件をみたすべきである．

水素原子の基底状態は $\psi_0=\exp(-r/a_B)/\sqrt{\pi}$ である（$a_B=\hbar^2/me^2$ はボーア半径）．課された条件をまんぞくする方程式 (2) の解は，$f=-ira_B\left(a_B+\dfrac{r}{2}\right)$ である．ここまでくると，公式 (1) によって，α がえられ次のようになる[1]：

$$\alpha=\frac{2i}{a_B}(rf\cos^2\theta)_{00}=\frac{2i}{3a_B}(rf_{00})=\frac{9}{2}a_B^3.$$

5.　$a\kappa\ll1$ となるような力の到達半径 a をもつポテンシャルの井戸の中に束縛された s 状態の電子の分極率を計算せよ．ここで，$\kappa=\sqrt{2m|E_0|}/\hbar$，$|E_0|$ は電子の束縛エネルギーである．

解　条件 $\kappa a\ll1$ のおかげで，行列要素 $(z\hat{b})_{00}$ を計算する場合に，井戸の内側の領域を無視することができて，井戸の外側の領域で成り立つ波動関数

$$\psi_0=\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{e^{-\kappa r}}{r}$$

を，全空間で用いることができる（この関数の規格化にも条件 $\kappa a\ll1$ が使われる：これについての詳細は，§133 参照）．前問の方程式 (2) は次の形になる：

$$\frac{f''}{2}-\kappa f'-\frac{f}{r^2}=ir.$$

そして，境界条件をまんぞくするこの方程式の解は $f=-ir^2/2\kappa$ である．公式 (1) によって計算すると，次の結果に到達する：

$$\alpha=\frac{me^2}{4\hbar^2\kappa^4}.$$

§ 77. 電場の中の水素原子

水素原子の準位は他の原子の準位と異なり，一様な電場の中で電場の１次に

1）次節では，別の方法でこの結果を導くことになる．

比例する分裂を起こす（**線形シュタルク効果**）．これは水素のエネルギー項に，偶然縮退が存在し，そのために（主量子数 n が同じで）l の値の異なる状態が同一エネルギーをもつからである．これらの状態間の遷移に対する双極モーメントの行列要素は決してゼロにならない．したがって永年方程式は1次近似ではやくもゼロでない準位の変移を与えるのである[1]．

非摂動波動関数の選び方を，縮退した状態の各組の間で摂動の行列が対角的になるようにとれば，計算につごうがよい．水素原子を放物座標の中で量子化すればこの目的は達せられることがわかる．放物座標で表わした水素原子の定常状態の波動関数 $\psi_{n_1n_2m}$ は公式（37.15），（37.16）で定義されている．

摂動の演算子（電場 $\mathscr{E}$ の中の電子のエネルギー）は $\mathscr{E}z=\mathscr{E}(\xi-\eta)/2$ である（電場は z 軸の正の方向を，また電子に働く力は z 軸の負の方向を向いている）[2]．われわれにとって興味があるのは遷移 $n_1n_2m\to n_1'n_2'm'$ に対する行列要素のうちでエネルギー（したがって主量子数 n）の変化しないものである．これらのうちでは次の対角行列要素だけがゼロでないことが容易にわかる：

$$\int|\psi_{n_1n_2m}|^2\mathscr{E}zdV=\frac{\mathscr{E}}{8}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^{2\pi}(\xi^2-\eta^2)|\psi_{n_1n_2m}|^2d\varphi d\xi d\eta$$
$$=\frac{\mathscr{E}}{4}\int_0^\infty\int_0^\infty f_{n_1m}^2(\rho_1)f_{n_2m}^2(\rho_2)(\rho_1^2-\rho_2^2)d\rho_1d\rho_2 \qquad (77.1)$$

（置換 $\xi=n\rho_1$，$\eta=n\rho_2$ を行なった）．この行列の量子数 m に関する対角性は明白である．一方量子数 n_1, n_2 に関する対角性は，異なる n_1 と同一の m をもつ関数 f_{n_1m} の間の直交性から導かれる（以下参照）．（77.1）の中の ρ_1 についての積分と ρ_2 についての積分は分離できて，得られた積分は数学的補遺の§f に計算されている（（積分（f.6））．簡単な計算ののちに結局エネルギー準位に対する1次近似の補正として[3]

$$E^{(1)}=\frac{3}{2}\mathscr{E}n(n_1-n_2) \qquad (77.2)$$

1）以下で行なう計算では水素準位の微細構造は考慮していない．したがって電場はあまり強くないが（摂動論の適用性の条件），それと同時に，シュタルク分裂が微細構造に比べて大きくなるほどには電場は強くなければならない．逆の場合は，第Ⅳ巻『相対論的量子力学』§52 参照．

2）本節では原子単位を採用する．

3）この結果は古典量子論に基づいて K. シュヴァルツシルトと P. エプスタイン（K. Schwarzschild, P. Epstein, 1916）により，また量子力学を用いて W. パウリと E. シュレーディンガー（W. Pauli, E. Schrödinger, 1926）によって導かれた．

あるいはふつうの単位で

$$E^{(1)}=\frac{3}{2}n(n_1-n_2)|e|\mathscr{E}\frac{\hbar^2}{me^2}$$

がえられる．分裂した準位の両端の成分は $n_1=n-1$, $n_2=0$ および $n_1=0$, $n_2=n-1$ に相当している．これら両端の準位の間隔は（77.2）によって

$$3\mathscr{E}n(n-1)$$

である． すなわち シュタルク効果による準位の総分裂はほぼ n^2 に比例する．主量子数の増大とともに分裂が大きくなるのは当然である．なぜなら電子が核から離れていれば，それだけ原子の双極モーメントは大きくなるからである．

線形効果の存在は原子が非摂動状態において平均値

$$\bar{d}_z=-\frac{3}{2}n(n_1-n_2) \qquad (77.3)$$

なる双極モーメントをもっていることを意味している．このことは放物量子数によって指定される状態の原子の電荷分布が， 平面 $z=0$ に対して対称でないことと符合している（§37参照)．たとえば $n_1>n_2$ のときは，電子は主として z の正の側に滞在し，そのため原子の双極モーメントは外場と逆向きである（電子の電荷は負！）．

前節で示したように，一様な電場による縮退のとれ方は完全ではなく，場の方向への角運動量の投影の符号が異なる2重縮退の状態が必ず残る（いまの場合は角運動量の投影が $\pm m$ の状態)．しかし公式（77.2）からわかるように，水素の線形シュタルク効果の場合は，縮退のとれ方はここまでも及ばない——準位の変移は（n と n_1-n_2 を与えたとき）一般に m と n_2 には依存しない．それ以上に進んで縮退がとれるのは2次近似の効果である．$n_1=n_2$ の状態では線形シュタルク効果は一般に存在しないので，この2次の効果の計算が一層興味深い．

2次の効果を計算するためには通常の摂動論を使うのは不便である．摂動論では複雑な形の無限項の和を取り扱わなければならないからである．そのかわりいささか風変りな次のような方法を採用しよう．

一様な電場の中の水素原子のシュレーディンガー方程式は次の形をしている：

$$\left(\frac{1}{2}\triangle+E+\frac{1}{r}-\mathscr{E}z\right)\psi=0.$$

放物座標を用いれば，この方程式は，$\mathscr{E}=0$ のときと同じく変数分離が可能である．§37 の（37.7）と同じ置換を行なえば次の二つの方程式が導かれる：

$$\begin{aligned}&\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)+\left(\frac{E}{2}\xi-\frac{m^2}{4\xi}-\frac{\mathscr{E}}{4}\xi^2\right)f_1=-\beta_1 f_1, \qquad \beta_1+\beta_2=1,\\&\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left(\frac{E}{2}\eta-\frac{m^2}{4\eta}+\frac{\mathscr{E}}{4}\eta^2\right)f_2=-\beta_2 f_2.\end{aligned} \tag{77.4}$$

これは $\mathscr{E}$ の項が存在する点で（37.8）と異なっている．この方程式の中でエネルギー E を与えられた確定値をもつパラメーターと考えよう．また β_1, β_2 を対応する演算子の固有値と考えよう（これらの演算子が自己共役であることは容易に確かめられる）．これらの量はこれらの方程式を解いて E と $\mathscr{E}$ の関数として定められる．そのあとで条件 $\beta_1+\beta_2=1$ から外場の関数としてエネルギーが決められる．

方程式（77.4）を近似的に解く場合には，電場 $\mathscr{E}$ を含む項を小さな摂動と考える．ゼロ次近似（$\mathscr{E}=0$）では，この方程式はすでにわれわれのよく知っている解

$$f_1=\sqrt{\varepsilon}\,f_{n_1m}(\xi\varepsilon), \qquad f_2=\sqrt{\varepsilon}\,f_{n_2m}(\eta\varepsilon) \tag{77.5}$$

をもっている．ここで，関数 f_{n_1m} などは（37.16）と同じ式にエネルギーにかわるパラメーター

$$\varepsilon=\sqrt{-2E} \tag{77.6}$$

を導入したものである．量 β_1, β_2 のこれに対応する値は（等式（37.12）の中で n を $1/\varepsilon$ に置きかえて）

$$\beta_1^{(0)}=\left(n_1+\frac{|m|+1}{2}\right)\varepsilon, \qquad \beta_2^{(0)}=\left(n_2+\frac{|m|+1}{2}\right)\varepsilon \tag{77.7}$$

となる．すべての自己共役な演算子の固有関数がそうであるように，ε が同じで n_1 の値が異なる関数 f_1 は互いに直交している（われわれはすでにこのことを線形効果の考察の際に利用した）．（77.5）の関数は条件

$$\int_0^\infty f_1^2 d\xi=1, \qquad \int_0^\infty f_2^2 d\eta=1$$

によって規格化される．

β_1 と β_2 に対する 1 次近似の補正は摂動の対角行列要素によって決められ，

$$\beta_1^{(1)}=\frac{\mathscr{E}}{4}\int_0^\infty \xi^2 f_1^2 d\xi, \qquad \beta_2^{(1)}=-\frac{\mathscr{E}}{4}\int_0^\infty \eta^2 f_2^2 d\eta$$

となる．これを計算すると

$$\beta_1^{(1)}=\frac{\mathscr{E}}{4\varepsilon^2}(6n_1^2+6n_1|m|+m^2+6n_1+3|m|+2)$$

が得られる．$\beta_2^{(1)}$ の表式は n_1 を n_2 に置きかえ，また全体の符号を変えると得られる．

2次近似は摂動の一般論によって

$$\beta_1^{(2)}=\frac{\mathscr{E}^2}{16}\sum_{n_1'\neq n_1}\frac{|(\xi^2)_{n_1n_1'}|^2}{\beta_1^{(0)}(n_1)-\beta_1^{(0)}(n_1')}$$

となる． 行列要素 $(\xi^2)_{n_1n_1'}$ の中にあらわれる積分は数学的補遺の §f の中で計算されている．ゼロでないのは次の行列要素だけである：

$$(\xi^2)_{n_1,n_1-1}=(\xi^2)_{n_1-1,n_1}=-\frac{2}{\varepsilon^2}(2n_1+|m|)\sqrt{n_1(n_1+|m|)},$$

$$(\xi^2)_{n_1,n_1-2}=(\xi^2)_{n_1-2,n_1}=\frac{1}{\varepsilon^2}\sqrt{n_1(n_1-1)(n_1+|m|)(n_1+|m|-1)}.$$

分母にあらわれる差は

$$\beta_1^{(0)}(n_1)-\beta_1^{(0)}(n_1')=\varepsilon(n_1-n_1')$$

に等しい．計算の結果次式が得られる：

$$\beta_1^{(2)}=-\frac{\mathscr{E}^2}{16\varepsilon^5}(|m|+2n_1+1)[4m^2+17(2|m|n_1+2n_1^2+|m|+2n_1)+18]$$

($\beta_2^{(2)}$ の表式は n_1 を n_2 で置きかえたもの)． 得られた式を合わせて関係式 $\beta_1+\beta_2=1$ に代入すると，次の方程式が得られる：

$$\varepsilon n-\frac{\mathscr{E}^2 n}{16\varepsilon^5}[17n^2+51(n_1-n_2)^2-9m^2+19]+\frac{3}{2}\mathscr{E}\frac{n}{\varepsilon^2}(n_1-n_2)=1.$$

これを逐次近似で解くと，エネルギー $E=-\dfrac{\varepsilon^2}{2}$ に対する2次近似の式

$$E=-\frac{1}{2n^2}+\frac{3}{2}\mathscr{E}n(n_1-n_2)-\frac{\mathscr{E}^2}{16}n^4[17n^2-3(n_1-n_2)^2-9m^2+19] \quad (77.8)$$

が得られる．第2項はすでにわれわれの知っている線形シュタルク効果である．また第3項が求める2次の効果である (G. Wentzel, I. Waller, P. Epstein, 1926)． この量はつねに負であることに注意しよう． すなわち2次の効果によって項はつねに下方に変移する．双極モーメントの平均値は (77.8) を電場で微分すれば得られる．$n_1=n_2$ の状態では，これは

$$\bar{d}_z=\frac{n^4}{8}(17n^2-9m^2+19)\mathscr{E} \tag{77.9}$$

に等しい．したがって，基底状態 ($n=1, m=0$) における水素原子の分極率は 9/2 に等しい（また，§ 76，問題 4 も参照）．

水素のエネルギー項の絶対値は主量子数 n の増加とともに急激に低下するが，シュタルク分裂は増大する．この点で興味深いのは，電場がかなり強くて，それによってひき起こされる分裂が準位自身のエネルギーの大きさと同程度になり，そのため摂動論が適用できないような強く励起された準位のシュタルク効果を考察する場合である[1]．これは，n が大きい値をもつ状態の準古典性を利用して行なうことができる．

置換

$$f_1=\frac{\chi_1}{\sqrt{\xi}}, \qquad f_2=\frac{\chi_2}{\sqrt{\eta}} \tag{77.10}$$

によって方程式 (77.4) は次の形になる：

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2\chi_1}{d\xi^2}+\left(\frac{E}{2}+\frac{\beta_1}{\xi}-\frac{m^2-1}{4\xi^2}-\frac{\mathscr{E}}{4}\xi\right)\chi_1=0,\\
&\frac{d^2\chi_2}{d\eta^2}+\left(\frac{E}{2}+\frac{\beta_2}{\eta}-\frac{m^2-1}{4\eta^2}+\frac{\mathscr{E}}{4}\eta\right)\chi_2=0.
\end{aligned} \tag{77.11}$$

さてこの方程式はそれぞれ 1 次元のシュレーディンガー方程式の形をしており，$E/4$ が粒子の全エネルギーの役割を受けもち，ポテンシャル・エネルギーの役割を果たしているのはそれぞれ次の関数である：

$$\begin{aligned}
U_1(\xi)&=-\frac{\beta_1}{2\xi}+\frac{m^2-1}{8\xi^2}+\frac{\mathscr{E}}{8}\xi,\\
U_2(\eta)&=-\frac{\beta_2}{2\eta}+\frac{m^2-1}{8\eta^2}-\frac{\mathscr{E}}{8}\eta.
\end{aligned} \tag{77.12}$$

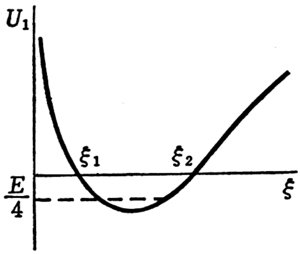
これらの関数の（$m>1$ の場合の）大体の形を第 25 図および第 26 図に示す．ボーア＝ゾンマーフェルトの量子化の規則 (48.2) によれば

---

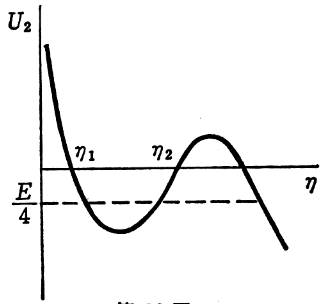
1) 摂動論の高い準位への適用性から要求されることは，摂動がその準位自身のエネルギー（電子の束縛エネルギー）に比べて小さいことだけであり，準位の間隔と比べて小さい必要はない．実際（強く励起された状態のような）準古典的な場合には，非摂動系の粒子に働く力に比べて摂動によって生ずる力が弱ければ，摂動を小さいと考えることができる．ところがこの条件は上述の条件と等価である．

$$\int_{\xi_1}^{\xi_2}\sqrt{2\left[\frac{E}{4}-U_1(\xi)\right]}d\xi=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\pi,$$
$$\int_{\eta_1}^{\eta_2}\sqrt{2\left[\frac{E}{4}-U_2(\eta)\right]}d\eta=\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\pi \qquad (77.13)$$

と書かれる（n_1, n_2 は整数）[1]．これらの方程式はパラメーター β_1, β_2 の E への依存性を間接的に定めている．したがってこれらを等式 $\beta_1+\beta_2=1$ とともに使



第 25 図



第 26 図

うと，エネルギー準位の電場による変移を決めることができる．方程式（77.13）の中の積分は楕円積分に帰着される．それゆえこの方程式は数値的にのみ解くことができる．

強電場におけるシュタルク効果はもう一つの現象——電場による原子のイオン化 (C. Lanczos, 1931)——によって複雑化される．外場の中の電子のポテンシャル・エネルギー $\mathscr{E}z$ は $z\to-\infty$ においていくらでも大きな負の値をとり得る．原子内の電子のポテンシャル・エネルギーにこれが加わると，原子内部の領域の他に，陽極の方に向かって核から遠く離れた領域も電子の運動可能な（電子の全エネルギーが負の）領域になる．これら二つの領域はポテンシャルの障壁でへだてられている．壁の厚さは電場が強くなるにつれて減少する．ところで量子力学では粒子がポテンシャル障壁を透過する確率は，つねにいくらかあって，ゼロではない．この場合電子が原子の内部から障壁を透過して外側に出ることは原子のイオン化に他ならない．弱い電場ではこのようなイオン化の確率は無視できるほど小さい．しかしこの確率は電場とともに指数関数的に

1)　さらに詳しい考察によれば，U_1, U_2 の表式の中で m^2-1 のかわりに m^2 と書くと，えられる結果は，さらに正確になる．その場合には整数 n_1 および n_2 は放物量子数に一致する．

増大して，十分に強い電場の中ではいちじるしいものとなる[1].

問　題

1. 条件 $\mathcal{E}\ll 1$（ふつうの単位では，$\mathcal{E}\ll m^2|e|^5/\hbar^4$）にしたがう電場の中の（基底状態にある）水素原子の（単位時間当たりの）イオン化の確率を求めよ.

解[2] 放物座標ではポテンシャル障壁は《η 座標の方向に》存在する（第26図）. 原子から電子を $z\to-\infty$ の方向に引き出すことは，η の大きい領域に電子を移すことに対応している. イオン化の確率を求めるためには，η が大きいところでの波動関数の形を調べる必要がある（ただし ξ は大きくない. 以下で見るように飛び出す電子の確率の全流束を決める積分の中で重要なのは，小さい ξ である）.（電場のない場合の）基底状態の電子の波動関数は

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-(\xi+\eta)/2} \tag{1}$$

である. 電場があっても ψ の ξ への依存性は，われわれにとって興味のある領域では (1) と同じであると考えることができる. しかし η への依存性を決定するために次の方程式を用意する：

$$\frac{\partial^2\chi}{\partial\eta^2}+\left(-\frac{1}{4}+\frac{1}{2\eta}+\frac{1}{4\eta^2}+\frac{\mathcal{E}\eta}{4}\right)\chi=0. \tag{2}$$

ここで $\chi=\sqrt{\eta}\,\psi$ である（これは方程式 (77.11) の第2式の中で $E=-1/2$, $m=0$, $\beta_2=1/2$ と置いたものである）. η_0 を（障壁より内側にあって）$1\ll\eta_0\ll 1/\mathcal{E}$ であるような η のある値とする. $\eta\gtrsim\eta_0$ では波動関数は準古典的である. 他方，方程式 (2) は1次元のシュレーディンガー方程式の形をしているので，公式 (50.2) を用いることができる. 境界条件として，点 $\eta=\eta_0$ において ψ と波動関数 (1) が一致することを要求すれば，障壁より外の領域で次式が得られる：

---

1) 上記の現象は，小さな摂動でもエネルギー・スペクトルの性格を変えてしまうことができることを示す好例である. 電場 $\mathcal{E}$ は弱くても，ポテンシャルの障壁をつくり，核から離れたところに電子が原理的にうけ入れられる領域をつくるには十分である. その結果電子の運動は厳密には有限でなくなり，そのためエネルギー・スペクトルは離散的から連続的に移る. それにもかかわらず摂動論の方法で得た形式的な解は物理的に意味をもっている. すなわちそれは完全ではないが，《ほとんど定常的な》状態のエネルギー準位を定めている. はじめのある時刻にこのような状態にあった原子は，それから長い時間経ってもその状態にとどまっているのである.

それと同時に準位のシュタルク分裂を表わす摂動級数は，すべて厳密な意味では収束せず，漸近級数であるにすぎない. すなわち，この級数の中のある位置（それは摂動の大きさが小さければ小さいほど，遠い位置になる）より高次では，ある項の次にくる項は増大はしても，減少することはない.

2) この問題では，原子単位を用いる.

$$\chi=\left(\frac{\eta_0|p_0|}{\pi p}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{\xi+\eta_0}{2}+i\int_{\eta_0}^{\eta}pd\eta+\frac{i\pi}{4}\right).$$

ここで

$$p(\eta)=\sqrt{-\frac{1}{4}+\frac{1}{2\eta}+\frac{1}{4\eta^2}+\frac{\mathcal{E}\eta}{4}}$$

である．以下でわれわれにとって興味のあるのは自乗 $|\chi|^2$ だけである．それゆえ指数の虚部は重要でない．方程式 $p(\eta)=0$ の根を η_1 と書けば，次式が得られる：

$$|\chi|^2=\frac{\eta_0|p_0|}{\pi p}\exp\left(-\xi-2\int_{\eta_0}^{\eta_1}|p|\,d\eta-\eta_0\right). \qquad (3)$$

指数関数にかかる因子の中では $\eta\gg1$ なので

$$|p_0|\cong1/2,\qquad p\cong\frac{1}{2}\sqrt{\mathcal{E}\eta-1}$$

と置く．しかし指数の中では関数 $p(\eta)$ の展開の次の項もとっておく必要がある．すると

$$|\chi|^2=\frac{\eta_0}{\pi\sqrt{\mathcal{E}\eta-1}}\exp\left(-\xi-\int_{\eta_0}^{\eta_1}\sqrt{1-\mathcal{E}\eta}\,d\eta+\int_{\eta_0}^{\eta_1}\frac{d\eta}{\eta\sqrt{1-\mathcal{E}\eta}}-\eta_0\right)$$

となる． ここでは，$\eta_1=1/\mathcal{E}$ である． 積分を実行し，また可能な限り $\eta_0\mathcal{E}$ を 1 に比べて無視すれば，次式が得られる：

$$|\chi|^2=\frac{4}{\pi\mathcal{E}\sqrt{\mathcal{E}\eta-1}}\exp\left(-\xi-\frac{2}{3\mathcal{E}}\right). \qquad (4)$$

z 軸に垂直な平面を通る確率の全流束，すなわち求めるイオン化の確率 w は

$$w=\int_0^\infty|\psi|^2v_z2\pi\rho d\rho$$

である（ρ は上記の平面上の円筒半径）．η が大きく ξ が小さいところでは

$$d\rho=d\sqrt{\xi\eta}\approx\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\eta}{\xi}}d\xi$$

と置くことができる．また電子の速度として

$$v_z\approx\sqrt{2\left(-\frac{1}{2}+\frac{\mathcal{E}\eta}{2}\right)}=\sqrt{\mathcal{E}\eta-1}$$

を代入すれば

$$w=\int_0^\infty|\chi|^2\pi\sqrt{\mathcal{E}\eta-1}d\xi$$

が得られる．これから結局次の式がえられる：

$$w=\frac{4}{\mathcal{E}}\exp\left(-\frac{2}{3\mathcal{E}}\right) \qquad (5)$$

ふつうの単位では，これは

$$w=\frac{4m^3|e|^9}{\mathcal{E}\hbar^7}\exp\left(-\frac{2m^2|e|^5}{3\mathcal{E}\hbar^4}\right)$$

となる．

2. 短距離力のポテンシャルの井戸の中に電子が束縛されて s 状態にあるとき，電場によってその電子が奪い去られる確率を求めよ．電場は弱くて $|e|\mathcal{E}\ll\hbar^2\kappa^3/m$ が成り立っ

ていると仮定する．ここで $\kappa=\sqrt{2m|E|}/\hbar$，$|E|$ は井戸の中の電子の束縛エネルギー，m は電子質量である（デムコフ Ю.Н. Демков，ドルカーレフ Г.Ф. Друкарев, 1964).

解　弱い電場の場合には，問題1と同じように，中心から遠く離れた距離（$\kappa r\gg 1$）が重要である．このような距離では，（電場 $\mathcal{E}$ がない場合の）井戸の中の電子の束縛状態の波動関数は次のような漸近形をもっている：

$$\psi=\frac{A\sqrt{\kappa}}{r}e^{-\kappa r}$$

ここで，A は井戸の具体的な形に依存する無次元の定数である[1]．放物座標では，$r=(\xi+\eta)/2$ となり，$\eta\gg\xi$ となる領域では，波動関数は次の形をとる：

$$\psi\approx\frac{2A\sqrt{\kappa}}{\eta}\exp\left[-\frac{\kappa}{2}(\xi+\eta)\right]. \qquad (6)$$

以後この問題の中では，質量，長さ，および時間は，それぞれ単位 m，$1/\kappa$，および $m/\hbar\kappa^2$ で測ることにしよう．

関数（6）は，ξ の関数と η の関数の積に分解される．電場が存在する場合は，ψ の ξ への依存性は（問題1のように）(6) 式と同じと考えることができる．次に ψ の η への依存性を決めるために，放物座標で書かれたシュレーディンガー方程式を見てみよう．いまの場合は（クーロン場の場合と違って），井戸の場は急速に減少するので，この問題で重要な遠い距離では，この場を一般に無視することができる．それからシュレーディンガー方程式の中で変数分離を行なうと，ふたたび方程式 (77.11) が導かれる．ただし，この中で $E=-1/2$, $m=0$ と置かなければならない．また分離パラメーターは，こんどは次の条件をみたしている：

$$\beta_1+\beta_2=0.$$

（$\xi\mathcal{E}$ の小さいとき，$\psi\propto e^{-\xi/2}$ なる依存性が，(77.11) の中の第1方程式を近似的にまんぞくするように）パラメーター β_1 は $1/2$ に等しく置かなければならない．そうすると $\beta_2=-1/2$ となり，ψ の η への依存性を決めるための方程式は，次のようになる：

$$\frac{\partial^2\chi}{\partial\eta^2}+\left(-\frac{1}{4}-\frac{1}{2\eta}+\frac{1}{4\eta^2}+\frac{\mathcal{E}}{4}\eta\right)\chi=0, \qquad \chi=\psi\sqrt{\eta}.$$

この方程式を，方程式（2）を解いたようにして解くと，こんどは（3）の代りに次の式がえられる：

$$|\chi|^2=\frac{4A^2|p_0|}{\eta_0 p}\exp\left(-\xi-2\int_{\eta_0}^{\eta_1}|p|\,d\eta-\eta_0\right),$$

ここで

$$p(\eta)=\sqrt{-\frac{1}{4}-\frac{1}{2\eta}+\frac{1}{4\eta^2}+\frac{\mathcal{E}\eta}{4}}$$

である．さらに，(4) に代って

---

1) たとえば，井戸の半径 a が小さくて $a\kappa\ll 1$ であれば，$A=(2\pi)^{-1/2}$ となる．もっとくわしくは § 133 参照.

$$|\chi|^2=\frac{A^2\mathscr{E}}{\sqrt{\mathscr{E}\eta-1}}\exp\left(-\xi-\frac{2}{3\mathscr{E}}\right)$$

がえられる．最後に (5) に代って

$$w=\pi A^2\mathscr{E}\exp\left(-\frac{2}{3\mathscr{E}}\right)$$

あるいは，ふつうの単位で

$$w=\frac{\pi|e|\mathscr{E}A^2}{\hbar\kappa}\exp\left(-\frac{2\hbar^2\kappa^3}{3m|e|\mathscr{E}}\right)$$

がえられる．

3.　一様な変動電場 $\mathscr{E}=\mathscr{E}_0\cos\omega t$ をかけたとき，ポテンシャルの井戸から電子が奪い去られる確率を指数の精度で評価せよ．電場の振動数と振幅は次の条件をまんぞくすると仮定しよう．

$$\hbar\omega\ll|E|,\qquad |e|\mathscr{E}_0\ll\hbar^2\kappa^3/m,$$

ここで，$\kappa=\sqrt{2m|E|}/\hbar$，$|E|$ は井戸の中の電子の束縛エネルギーである（ケルディシ Л. В. Келдыш, 1964)[1]．

解　課された条件の下では，奪い去られる確率 w は指数関数的に小さい．（指数関数のまえの因子を除いて）指数関数のたった一つの指数を計算するだけならば，運動を電場方向，z 軸方向の一次元運動と見て十分である．

ここでは，電場をスカラー・ポテンシャルではなく，ベクトル・ポテンシャル：$A_z=A=-(c\mathscr{E}_0/\omega)\sin\omega t$ で記述するのがよい．そうすると，井戸の外側では，電子のハミルトニアンは次の形になる：

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}+\frac{|e|\mathscr{E}_0}{\omega}\sin\omega t\right)^2$$

（以下の (111.3) 参照)．これは z 座標を含まない．無次元の変数と無次元のパラメーターを

$$\tau=\frac{\hbar\kappa^2}{2m}t,\quad \eta=2\kappa z,\quad \Omega=\frac{2m\omega}{\hbar\kappa^2}=\frac{\hbar\omega}{|E|},\quad F=\frac{|e|m\mathscr{E}_0}{\hbar^2\kappa^3}$$

によって導入すると，シュレーディンガー方程式は次の形に書かれる：

$$\frac{i}{4}\frac{\partial\Psi}{\partial\tau}=-\left(\frac{\partial}{\partial\eta}+\frac{iF}{\Omega}\sin\Omega\tau\right)^2\Psi.$$

この方程式に対する境界条件になるのは，その解 $\Psi(\eta,\tau)$ と井戸の中の電場の摂動を受けない（エネルギーが $E=-|E|$ の）電子の波動関数が，$\eta\to0$ において一致するという要請：

$$\eta\to0 \text{ のとき，} \Psi\to e^{i\tau} \tag{7}$$

---

1)　これによって，例えば，強力な光波による1価陰イオンのイオン化を論ずることができるだろう．この場合，ポテンシャルの井戸は電子と中性の残存原子の間の相互作用によってつくられている．条件 $\hbar\omega\ll|E|$ によって，電磁波の場を古典的に考えることが，このとき許されるのである．

である．

問題が準古典的なので，$\Psi=\exp iS$ という形の解を（指数の精度で）求めよう．ここで $S(\eta,\tau)$ は古典力学の作用である．ハミルトニアンは座標 η に依存しないので，一般化運動量 $p_\eta=p$ は古典的軌道に沿って保存される．それで

$$S=-\int_{\tau_0}^{\tau} H(p,\tau')d\tau'+\eta p+A, \qquad H(p,\tau)=4\left(p+\frac{F}{\Omega}\sin\Omega\tau\right)^2 \tag{8}$$

となる．ここで，A, τ_0 は定数である．さらに，座標の関数としての作用のもつ意味に則して（第 I 巻，『力学』§ 43 参照），p には軌道を通って時刻 τ に与えられた点 η に到達するような値を考える．すなわち，p を，運動方程式 $\partial S/\partial p=\mathrm{const}$ によって決定される η と τ の関数であると考えよう．すなわち

$$\eta=\int_{\tau_0}^{\tau}\frac{\partial H(p,\tau')}{\partial p}d\tau' \tag{9}$$

である（定数は $\tau=\tau_0$ のとき $\eta=0$ となるように選ばれている）．公式 (8) と (9) は二つの定数 τ_0 と A に依存する作用を与えている．条件 (7) をみたす解をえるためには（ハミルトン=ヤコビの方程式の一般積分を求める場合と同様に，——第 I 巻『力学』§ 47，187 ページの脚注参照），A を τ_0 の関数と考え，さらに τ_0 を条件

$$\frac{\partial S}{\partial \tau_0}=0 \tag{10}$$

から決まる座標と時間の関数と考える必要がある．明らかに，$A(\tau_0)=\tau_0$ と置くべきである．そうすると，$\tau=\tau_0$ のとき，$\eta=0$ があるから，$S=\tau_0$ すなわち，$S=\tau$ となって，条件 (7) と一致するからである．このとき条件 (10) は次のように書き換えられる：

$$H(p,\tau_0)+1=0. \tag{11}$$

方程式 (9) と (11) を連立させると，関数 $\tau_0(\eta,\tau)$ と $p(\eta,\tau)$ が決定され，したがって，((8) に代入すると）波動関数 $\Psi(\eta,\tau)$ がえられる．

求める確率 w は z 軸方向の流れの密度に比例する．古典力学的に侵入できる領域では，この密度は $v_z|\Psi|^2$ である．この領域の原点は，$\mathrm{Im}\,S$ が増加を止める点として定義される．この点では $(\partial\,\mathrm{Im}\,S/\partial\eta)_\tau=0$ であるが，$\partial S/\partial\eta=p$ なので，$\mathrm{Im}\,p=0$ となる．そうすると，(9) と (11) から，この点で $\mathrm{Re}\,p=0$ も成り立たなければならなくなる．この条件から，τ_0 の値が決定される．(11) の中で $p=0$ と置くと

$$\frac{4F^2}{\Omega^2}\sin^2\Omega\tau_0=-1$$

がえられ，これから

$$\Omega\tau_0=i\,\mathrm{Arc}\sin\gamma, \qquad \gamma=\frac{\Omega}{2F}=\frac{\sqrt{2m|E|}}{|e|\mathscr{E}_0}\omega$$

がえられる（《時刻》τ_0 が虚数であることは，この過程が古典力学的には起こり得ないことを示している）．結局次の式がえられる：

$$w\propto\exp\left\{-2\,\mathrm{Im}\left[\int_{\tau}^{\tau_0}\frac{4F^2}{\Omega^2}\sin^2\Omega\tau'd\tau'+\tau_0\right]\right\},$$

この中では，τ としては任意の実数値をとってよい（積分の虚数部分はそれに依存しない）．積分を計算すると

$$w \backsim \exp\left\{-\frac{2|E|}{\hbar\omega}f(\gamma)\right\}, \qquad f(\gamma)=\left(1+\frac{1}{2\gamma^2}\right)\mathrm{Arc}\sin\gamma-\frac{\sqrt{1+\gamma^2}}{2\gamma} \qquad (12)$$

がえられる．関数 $f(\gamma)$ の極限の関数形は次の通りである：

$$\gamma\ll 1 \text{ のとき } \quad f(\gamma)\approx\frac{2\gamma}{3}, \qquad \gamma\gg 1 \text{ のとき } \quad f(\gamma)\approx\ln 2\gamma-\frac{1}{2}.$$

$\gamma\to 0$ における w の極限の表式は粒子がポテンシャルの井戸から一様電場によって奪い去られる確率に対応している．

公式（12）は指数関数の指数が大きい場合に適用可能である．このためには，必ず $\hbar\omega\ll|E|$ でなければならない．

数学的補遺

§ a. エルミート多項式

方程式

$$y''-2xy'+2ny=0 \tag{a. 1}$$

は，**ラプラスの方法**[1] を用いて解くことのできる方程式の型に属している．

この方法は一般に係数が x の１次を越えない

$$\sum_{m=0}^{n}(a_m+b_m x)\frac{d^m y}{dx^m}=0$$

なる形の線形方程式に適用され，以下のようにまとめられる．多項式

$$P(t)=\sum_{m=0}^{n}a_m t^m, \qquad Q(t)=\sum_{m=0}^{n}b_m t^m$$

をつくり，次にそれを用いて定数因子を除いて定義された関数

$$Z(t)=\frac{1}{Q}\exp\int\frac{P}{Q}dt$$

をつくる．すると考察している方程式の解は次の複素積分の形であらわすことができる：

$$y=\int_C Z(t)e^{xt}dt.$$

ここで積分路 C は，積分が有限でかつゼロでない値をもち，しかも t が C の全路線を描き終われば，関数

$$V=e^{xt}QZ$$

がその最初の値に戻るように選ばれる（このとき径路 C は閉じても閉じなくてもよい）．方程式（a. 1）の場合には

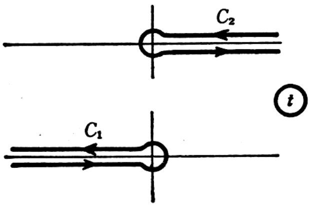
1) たとえば，Goursat, *Cours d' Analyse Mathématique*, 第２巻；В. И. Смирнов, Курс высшей математики, т. III, часть 2, Наука, 1969（彌永昌吉他監訳，スミルノフ高等数学教程，III巻，２部，２分冊，５章，（相沢貞一訳）共立出版，1962）を参照．

$$P=t^2+2n,\quad Q=-2t,\quad Z=-\frac{1}{2t^{n+1}}e^{-t^2/4},\quad V=\frac{1}{t^n}e^{xt-t^2/4}.$$

を得る．したがってその解は次の形になる：

$$y=\int e^{xt-t^2/4}\frac{dt}{t^{n+1}}.\qquad\text{(a. 2)}$$

物理的な応用のためには $n>-1/2$ なる値を考えるだけで十分である．このような n に対しては，積分路として径路 C_1 または C_2（a-1 図）を選ぶことができる．これらの径路は必要条件を満足している．なぜならこれらの径路の末端（$t=+\infty$ または $t=-\infty$）で関数 V はゼロとなるからである[1]．

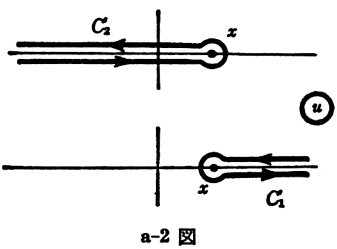


a-1 図

方程式（a. 1）がすべての有限な x の値において有限で，しかも，$x\to\pm\infty$ においてたかだか x の有限のベキで無限大になるような解をもつためには，パラメーター n がどのような値であればよいか，ということを明らかにしよう．最初に非整数の n を考えよう．この場合 C_1 および C_2 に沿った積分（a. 2）は，方程式（a. 1）の二つの独立な解を与える．$t=2(x-u)$ によって変数 u を導入して，C_1 に沿った積分を変形しよう．定数因子を省略すると

$$y=e^{x^2}\int_{C_1'}\frac{e^{-u^2}}{(u-x)^{n+1}}du\qquad\text{(a. 3)}$$

を得る．ここで積分は，a-2 図に示す複素変数 u の平面上の径路 C_1' に沿って行なわれる．



a-2 図

$x\to+\infty$ のときは，全積分路 C_1' は無限遠へ移動し，式（a. 3）の積分は e^{-x^2} のようにゼロに収束する．しかし $x\to-\infty$ のときは，積分路は全実軸上に拡がり，（a. 3）の積分も指数関数的にゼロに収束せず，したがって，関数 $y(x)$ は

1）これらの径路は負の整数 n に対しては不適当である．なぜならば，このような n に対して，これらの径路に沿った積分（a. 2）は恒等的にゼロとなるからである．

e^{x^2} のように主項が無限大となる．同様にして，径路 C_2 に沿った積分 (a. 2) は $x \to +\infty$ において指数関数的に発散することが容易にわかる．

これに反し n が（ゼロおよび）正の整数のときは，積分路の直線部分に沿った積分は互いに相殺し，C_1' および C_2' に沿った二つの積分 (a. 3) は，点 $u=x$ の回りの閉じた径路に沿った積分になる．したがって前に述べた条件を満足する次の解を得る：

$$y(x)=e^{x^2}\oint\frac{e^{-u^2}}{(u-x)^{n+1}}du.$$

解析関数の導関数に対するよく知られたコーシーの関係式

$$f^{(n)}(x)=\frac{n!}{2\pi i}\oint\frac{f(t)}{(t-x)^{n+1}}dt$$

により，$y(x)$ は定数因子を除いて**エルミート多項式**となる：

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}. \qquad \text{(a. 4)}$$

多項式 H_n は x の降ベキの順に展開して，あらわに書くと次の形をもつ：

$$H_n(x)=(2x)^n-\frac{n(n-1)}{1}(2x)^{n-2}+\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1\cdot 2}(2x)^{n-4}-\cdots. \qquad \text{(a. 5)}$$

この式は数 n の偶奇と同じ偶奇の x のベキだけを含んでいる．最初のいくつかのエルミート多項式を書いておこう：

$$H_0=1,\quad H_1=2x,\quad H_2=4x^2-2,\quad H_3=8x^3-12x,$$
$$H_4=16x^4-48x^2+12. \qquad \text{(a. 6)}$$

規格化積分の計算を行なうためには，$e^{-x^2}H_n$ を (a. 4) から求めた式で置きかえる．それを n 回部分積分すると，次式が得られる：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}H_n^2(x)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}(-1)^n H_n(x)\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}\frac{d^n H_n}{dx^n}dx.$$

ところが $\dfrac{d^n H_n}{dx^n}$ は定数で $2^n n!$ に等しいので，結局

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}H_n^2(x)dx=2^n n!\sqrt{\pi} \qquad \text{(a. 7)}$$

となる．

§ b. エアリ関数

方程式

$$y''-xy=0 \tag{b.1}$$

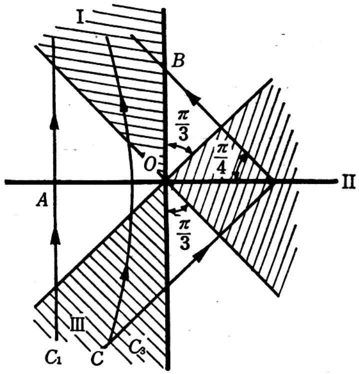
もまたラプラス型に属する．一般的方法に従って次の諸関数をつくる：

$$P=t^2,\quad Q=-1,\quad Z=-e^{-t^3/3},\quad V=e^{xt-t^3/3}.$$

したがって解は次の形にあらわすことができる：

$$y(x)=\text{const}\cdot\int_C e^{xt-t^3/3}dt. \tag{b.2}$$

このとき積分路Cは，その両端で関数Vがゼロとなるように選ばなければならない．このためにはこれらの両端は，複素変数tの平面上の$\mathrm{Re}(t^3)>0$なる領域を無限遠までもって行かなければならない（b–1図ではこれらの領域に斜線をつけてある）．



b–1 図

すべてのxで有限な解は，図に示すように，積分路Cを選べば得られる．この径路は，斜線をつけた二つの扇形領域（b–1図IのおよびIII）で両端が無限遠まで遠ざかるという条件さえあれば，任意に動かすことができる．たとえば，IIIとIIの扇形領域を通過する径路を選べば，$x\to\infty$で無限大となる解が得られてしまうので注意しよう．

径路Cを虚軸に一致するように移動すると，関数（b.2）は次の形で得られる（置換$t=iu$を行なった）：

$$\Phi(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\cos\left(ux+\frac{u^3}{3}\right)du. \tag{b.3}$$

（b.2）の定数 const は$-i/2\sqrt{\pi}$と置いた．そしてこのように定義された関数を$\Phi(x)$であらわした．これは**エアリ関数**と呼ばれている[1]．

1) われわれはフォック（В. А. Фок）によって提案された定義に従っている（ゲ・デ・ヤコヴレヴァ著『エアリ関数表』ナウカ，1969（Г. Д. Яковлева, Таблицы функции Эйри, Наука, 1969）を見よ．関数$\Phi(x)$はフォックによって導入された二つの関数のうちの一つで，彼によって$V(x)$とあらわされたものである．この文献において，（b–3）と定数因子が異なるエアリ関数の定義も用いられている．すなわち$\mathrm{Ai}\,x=\Phi(x)/\sqrt{\pi}$.

x の大きな値に対する $\Phi(x)$ の漸近形は，積分 (b. 2) を鞍点法で計算して得ることができる．$x>0$ のとき被積分式の指数は $t=\pm\sqrt{x}$ に極値をもち，その《最急降下》の方向は虚軸に平行である．したがって x の大きな正の値に対する漸近形を得るには，指数を $t+\sqrt{x}$ のベキに展開し，虚軸に平行な直線 C_1 (b-1 図参照）に沿って積分すればよい（距離 $OA=\sqrt{x}$)．$t=-\sqrt{x}+iu$ なる置換を行なうと

$$\Phi(x)\approx\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}-\sqrt{x}\,u^2\right)du$$

を得る．これから

$$\Phi(x)\approx\frac{1}{2x^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}} \tag{b. 4}$$

となる，したがって大きな正の x に対して関数 $\Phi(x)$ は指数関数的に減衰する．

x の大きな負の値に対する漸近形を得るには，$x<0$ のとき指数が

$$t=i\sqrt{|x|}\quad \text{および}\quad t=-i\sqrt{|x|}$$

に極値をもつことに着目する．またこれらの点における最急降下の方向は，それぞれ実軸と角度 $-\pi/4$ および $\pi/4$ をなす直線に沿っている．積分路として折れ線 C_3（距離 $OB=\sqrt{|x|}$）を選ぶと，簡単な変形を行なったのちに

$$\Phi(x)=\frac{1}{|x|^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2}+\frac{\pi}{4}\right) \tag{b. 5}$$

を得る．したがって大きな負の x の領域では，関数 $\Phi(x)$ は振動的な性質をもっている．関数 $\Phi(x)$ の最初の（そして最大の）極大値は $\Phi(-1.02)=0.95$ であることを指摘しておこう．

エアリ関数は 1/3 次のベッセル関数を用いてあらわすことができる．方程式 (b. 1) は容易にわかるように次の解をもつ：

$$\sqrt{x}\,Z_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right).$$

ここで $Z_{1/3}(x)$ は 1/3 次のベッセル方程式の任意の解である．(b. 3) と一致する解は

$$x>0\ \text{では}\quad \Phi(x)=\frac{\sqrt{\pi x}}{3}\left[I_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)-I_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)\right]\equiv\sqrt{\frac{x}{3\pi}}K_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right), \tag{b. 6}$$

$x<0$ では　$\Phi(x)=\dfrac{\sqrt{\pi|x|}}{3}\left[J_{-1/3}\left(\dfrac{2}{3}|x|^{3/2}\right)+J_{1/3}\left(\dfrac{2}{3}|x|^{3/2}\right)\right]$

となる．ここで

$$I_\nu(x)=i^{-\nu}J_\nu(ix),\qquad K_\nu(x)=\frac{\pi}{2\sin\nu\pi}[I_{-\nu}(x)-I_\nu(x)]$$

である．漸化式

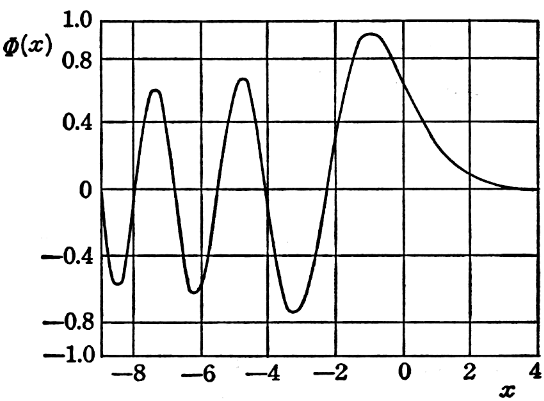
$$K_{\nu-1}(x)-K_{\nu+1}(x)=-\frac{2\nu}{x}K_\nu(x),\qquad 2K'_\nu(x)=-K_{\nu-1}(x)-K_{\nu+1}(x)$$

を用いると，エアリ関数の導関数に対する次の表式を得る：

$$x>0 \text{ では}\quad \Phi'(x)=-\frac{x}{\sqrt{3\pi}}K_{2/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right). \tag{b.7}$$

$$x=0 \text{ では}\quad \Phi(0)=\frac{\sqrt{\pi}}{3^{2/3}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}=0.629,\qquad \Phi'(0)=-\frac{3^{1/6}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{2\sqrt{\pi}}=-0.459.$$

b-2 図にエアリ関数のグラフを示す．



b-2 図

§ c.　ルジャンドル多項式[1)]

ルジャンドル多項式 $P_l(\cos\theta)$ は次式で定義される：

1）数学の文献には球関数の理論のすぐれた解説が多数ある．ここではこれらの関数の理論の体系的解説にはまったく立ち入らないで，参照用としていくつかの基本的関係式を導くにとどめる．

$$P_l(\cos\theta)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{(d\cos\theta)^l}(\cos^2\theta-1)^l. \tag{c. 1}$$

これらは微分方程式

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP_l}{d\theta}\right)+l(l+1)P_l=0 \tag{c. 2}$$

を満足する．

ルジャンドル陪多項式は次式で定義される：

$$P_l^m(\cos\theta)=\sin^m\theta\frac{d^m P_l(\cos\theta)}{(d\cos\theta)^m}=\frac{1}{2^l l!}\sin^m\theta\frac{d^{l+m}}{(d\cos\theta)^{l+m}}(\cos^2\theta-1)^l, \tag{c. 3}$$

またはこれと同等であるが

$$P_l^m(\cos\theta)=(-1)^m\frac{(l+m)!}{(l-m)!2^l l!}\sin^{-m}\theta\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}(\cos^2\theta-1)^l. \tag{c. 4}$$

ここで $m=0, 1, \cdots, l$ である．ルジャンドル陪多項式は次の方程式を満足する：

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP_l^m}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]P_l^m=0. \tag{c. 5}$$

ルジャンドル多項式の規格化積分 $\int_{-1}^{1}[P_l(\mu)]^2 d\mu$ ($\mu=\cos\theta$) の計算のためには，この式の中に(c. 1)を代入し，l 回部分積分を行なうと次式が得られる：

$$\frac{(-1)^l}{2^{2l}(l!)^2}\int_{-1}^{1}(\mu^2-1)^l\frac{d^{2l}}{d\mu^{2l}}(\mu^2-1)^l d\mu=\frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2}\int_{-1}^{1}(1-\mu^2)^l d\mu.$$

$u=(1-\mu)/2$ と置くと，この積分はオイラーのベータ関数に帰着し，

$$\int_{-1}^{1}[P_l(\mu)]^2 d\mu=\frac{2}{2l+1} \tag{c. 6}$$

を得る．同様にして異なる l をもつ関数 $P_l(\mu)$ は互いに直交することがわかる：

$$\int_{-1}^{1}P_l(\mu)P_{l'}(\mu)d\mu=0, \quad l\neq l'. \tag{c. 7}$$

ルジャンドル陪多項式に対する規格化積分の計算は同様の方法で容易に行なうことができる．それには $[P_l^m(\mu)]^2$ を式 (c. 3) と (c. 4) の積の形に書き，$l-m$ 回部分積分を行なう．その結果

$$\int_{-1}^{1}[P_l^m(\mu)]^2 d\mu=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \tag{c. 8}$$

を得る．容易に確かめられるように，（同じ m をもちながら）異なる l をもつ関数 P_l^m は互いに直交する：

$$\int_{-1}^{1} P_l^m(\mu) P_{l'}^m(\mu) d\mu = 0, \quad l \neq l'. \tag{c. 9}$$

三つのルジャンドル多項式の積の積分の計算は § 107 で考察されている．

ルジャンドル多項式に対しては，次の**加法定理**が成り立つ．いま γ を球角 θ, φ および θ', φ' によって定義される二つの方向の間の角度としよう：$\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi - \varphi')$．すると

$$P_l(\cos\gamma) = P_l(\cos\theta) P_l(\cos\theta') + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos\theta) P_l^m(\cos\theta') \cos m(\varphi - \varphi') \tag{c. 10}$$

が成り立つ．この定理は（(28.7) で定義される）球関数を用いて，次の形に書くことができる：

$$P_l(\boldsymbol{nn}') = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\boldsymbol{n}') Y_{lm}(\boldsymbol{n}). \tag{c. 11}$$

ここで $\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}'$ は二つの単位ベクトルであり，$Y_{lm}(\boldsymbol{n})$ は固定された座標系に関する方向 $\boldsymbol{n}$ の極角と方位角の球関数を表わしている．

等式 (c. 10) に $P_{l'}(\cos\theta)$ を掛け，それを $do = \sin\theta d\theta d\varphi$ に関して積分すると，等式の右辺の因子 $\cos m(\varphi - \varphi')$ を含むあらゆる項はゼロとなる．(c. 6), (c. 7) を考慮すると

$$\int P_l(\cos\gamma) P_{l'}(\cos\theta) do = \delta_{ll'} \frac{4\pi}{2l+1} P_l(\cos\theta')$$

を得る．この結果は，次の対称な形に書くことができる：

$$\int P_l(\boldsymbol{n}_1\boldsymbol{n}_2) P_{l'}(\boldsymbol{n}_1\boldsymbol{n}_3) do_1 = \delta_{ll'} \frac{4\pi}{2l+1} P_l(\boldsymbol{n}_2\boldsymbol{n}_3). \tag{c. 12}$$

ここで $\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2, \boldsymbol{n}_3$ は三つの単位ベクトルであり，積分はそれらのうちの一つである $\boldsymbol{n}_1$ の方向についてなされる．最後に，規格化された球関数 Y_{lm} の最初のいくつかの表式を書いておこう：

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta,$$

$$Y_{1,\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3\cos^2\theta),$$

$$Y_{2,\pm1}=\pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\cdot e^{\pm i\varphi},\qquad Y_{2,\pm2}=-\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\cdot e^{\pm2i\varphi},$$

$$Y_{30}=-i\sqrt{\frac{7}{16\pi}}\cos\theta(5\cos^2\theta-3),$$

$$Y_{3,\pm1}=\pm i\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{3,\pm2}=-i\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\cos\theta\sin^2\theta\cdot e^{\pm2i\varphi},$$

$$Y_{3,\pm3}=\pm i\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\cdot e^{\pm3i\varphi}.$$

§ d. 合流型超幾何関数

合流型超幾何関数は級数

$$F(\alpha,\gamma,z)=1+\frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!}+\cdots \tag{d.1}$$

によって定義される．この級数はすべての有限な z において収束する．パラメーター α は任意であるが，パラメーター γ はゼロや負の整数ではないと仮定する．もしも α が負の整数（またはゼロ）ならば，$F(\alpha,\gamma,z)$ は $|\alpha|$ 次の多項式になる．

関数 $F(\alpha,\gamma,z)$ は微分方程式

$$zu''+(\gamma-z)u'-\alpha u=0 \tag{d.2}$$

を満足する．このことは直接の検証によって容易に確かめられる[1]．$u=z^{1-\gamma}u_1$ なる置換を行なうことにより，この方程式は同じ形の方程式

$$zu_1''+(2-\gamma-z)u_1'-(\alpha-\gamma+1)u_1=0 \tag{d.3}$$

に変換される．これからわかるように，γ が整数でない場合には方程式 (d.2) は (d.1) とは1次独立な積分 $z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1,2-\gamma,z)$ を特解としてもつ．したがって方程式 (d.2) の一般解は次の形になる：

$$u=c_1F(\alpha,\gamma,z)+c_2z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1,2-\gamma,z). \tag{d.4}$$

第2項は，第1項とは異なり $z=0$ に特異点をもつ．

方程式 (d.2) はラプラス型に属し，その解は径路積分の形にあらわすこと

---

1) 負の整数の γ をもつ方程式 (d.2) は特別の考察を必要としない．それは（方程式 (d.3) へ変換することにより）正の整数の γ の場合に帰着させることができるからである．

ができる．一般的な方法に従って，次の諸関数をつくる：

$$P(t)=\gamma t-\alpha,\quad Q(t)=t(t-1),\quad Z(t)=t^{\alpha-1}(t-1)^{\gamma-\alpha-1}.$$

したがって

$$u=\int e^{tz}t^{\alpha-1}(t-1)^{\gamma-\alpha-1}dt \tag{d. 5}$$

である．積分路は，それを通過した後に関数 $V(t)=e^{tz}t^{\alpha}(t-1)^{\gamma-\alpha}$ がはじめの値に戻るように選ばなければならない．方程式（d. 3）に同じ方法を適用すれば，u に対する別の形の径路積分を得ることができる：

$$u=z^{1-\gamma}\int e^{tz}t^{\alpha-\gamma}(t-1)^{-\alpha}dt.$$

この積分において $tz\to t$ なる置換を行なうと，これをうまく次の形に導くことができる：

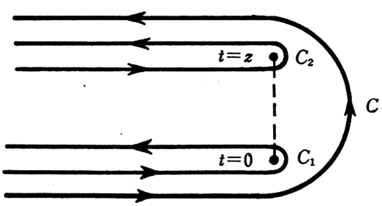
$$u(z)=\int e^{t}(t-z)^{-\alpha}t^{\alpha-\gamma}dt. \tag{d. 6}$$

このとき関数 V は

$$V(t)=e^{t}t^{\alpha-\gamma+1}(t-1)^{1-\alpha}$$

となる．

（d. 6）の被積分式は一般には $t=z$ と $t=0$ に二つの特異点をもつ．積分路 C は（$\mathrm{Re}\,t\to-\infty$ なる）無限遠点からやって来て，二つの特異点を正の方向に回り，ふたたび無限遠点へ遠ざかるように選ぼう（d-1 図）．この径路は，その両端で関数 $V(t)$ が ゼロになるので，必要条件を満足している．径路 C に沿って行なった積分（d. 6）は $z=0$ に特異点をもたない．したがってこの積分は定数因子を除いて，特異点をもたない関数 $F(\alpha,\gamma,z)$ と一致しなければならない．$z=0$ のときには被積分式の両特異点は一致する．ガンマ関数の理論のよく知られた公式によれば



d-1 図

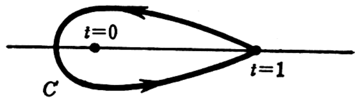
$$\frac{1}{2\pi i}\int_C e^{t}t^{-\gamma}dt=\frac{1}{\Gamma(\gamma)} \tag{d. 7}$$

である．ところが $F(\alpha,\gamma,0)=1$ であるので，明らかに

$$F(\alpha,\gamma,z)=\frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i}\int_C e^t(t-z)^{-\alpha}t^{\alpha-\gamma}dt \tag{d.8}$$

となる．

(d.5) の被積分式は $t=0$ および $t=1$ に特異点をもつ．もしも $\mathrm{Re}(\gamma-\alpha)>0$ でかつ γ が正の整数でなければ，積分路としては点 $t=1$ から出発し，



d-2 図

点 $t=0$ を正の方向に回り，$t=1$ へ戻る径路 C' (d-2 図) を選ぶことができる．

$\mathrm{Re}(\gamma-\alpha)>0$ のときは，このような径路に沿って回ると，関数 $V(t)$ は初めの値のゼロに戻る[1]．このようにして定義された積分もやはり $z=0$ に特異点をもたず，$F(\alpha,\gamma,z)$ と次の式で結ばれている：

$$F(\alpha,\gamma,z)=-\frac{1}{2\pi i}\frac{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}\oint_{C'} e^{tz}(-t)^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}dt. \tag{d.9}$$

積分 (d.8), (d.9) について次のような注意をしておかねばならない：α と γ が整数でない場合には，これらの被積分式は 1 価関数でない．各点におけるその値は，式中で累乗されるとき，複素量は偏角の絶対値が最小のものをとるという条件によって，選ばれるものとする．

つぎの有用な関係式

$$F(\alpha,\gamma,z)=e^zF(\gamma-\alpha,\ \gamma,\ -z) \tag{d.10}$$

に着目しよう．これは積分 (d.8) の中で $t\to t+z$ なる置換を行なえば，ただちに得られる．

すでに述べたように．n を正の整数として，もしも $\alpha=-n$ であれば，関数 $F(\alpha,\gamma,z)$ は多項式になる．これらの多項式に対しては簡単な公式を得ることができる．積分 (d.9) の中で $t\to 1-(t/z)$ なる置換を行ない，その結果得られる積分にコーシーの積分公式を適用すると次式を得る：

$$F(-n,\gamma,z)=\frac{1}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}z^{1-\gamma}e^z\frac{d^n}{dz^n}(e^{-z}z^{\gamma+n-1}). \tag{d.11}$$

もしもさらに m を正の整数として，$\gamma=m$ であれば，次のような公式も成り立つ：

---

1) もしも γ が正の整数であれば，C' としては 2 点 $t=0$ と $t=1$ を回る任意の径路を選ぶことができる．

$$F(-n,m,z)=\frac{(-1)^{m-1}}{m(m+1)\cdots(m+n-1)}e^z\frac{d^{m+n-1}}{dz^{m+n-1}}(e^{-z}z^n). \quad \text{(d. 12)}$$

この式は (d. 8) から $t\to z-t$ なる置換によって得られる積分にコーシーの積分公式を適用して得られる.

多項式 $F(-n,m,z)$ $(0\leqq m\leqq n)$ は, 定数因子を除いて次式で定義される**一般化ラゲール多項式**に等しい:

$$\begin{aligned}L_n^m(z)&=(-1)^m\frac{(n!)^2}{m!(n-m)!}F(-(n-m),m+1,z)\\&=\frac{n!}{(n-m)!}e^z\frac{d^n}{dz^n}e^{-z}z^{n-m}\\&=(-1)^m\frac{n!}{(n-m)!}e^zz^{-m}\frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}}e^{-z}z^n. \quad \text{(d. 13)}\end{aligned}$$

$m=0$ のときは多項式 L_n^m は $L_n(z)$ と書かれて, 単に**ラゲール多項式**と呼ばれる. (d. 13) より

$$L_n(z)=e^z\frac{d^n}{dz^n}(e^{-z}z^n)$$

を得る.

積分表式 (d. 8) は, z の大きいところでの合流型超幾何関数の漸近展開を得るのに適している. 積分路を変形して, それぞれ点 $t=0$ および $t=z$ を回る二つの径路 C_1 および C_2 に分けよう (d-1 図). だから径路 C_2 の下半分と径路 C_1 の上半分とは無限遠点でつながっていると考えなければならない. z の逆ベキによる展開式を得ることを考慮して, 被積分式の中の $(-z)^{-\alpha}$ を括弧の外にもっていく. 径路 C_2 に沿った積分の中では $t\to t+z$ なる置換を行なう. それによって径路 C_2 は径路 C_1 に変換される. その結果, 式 (d. 8) は次の形にあらわされる:

$$\begin{aligned}F(\alpha,\gamma,z)=&\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(-z)^{-\alpha}G(\alpha,\alpha-\gamma+1,-z)\\&+\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}e^zz^{\alpha-\gamma}G(\gamma-\alpha,1-\alpha,z). \quad \text{(d. 14)}\end{aligned}$$

ここで

$$G(\alpha,\beta,z)=\frac{\Gamma(1-\beta)}{2\pi i}\int_{C_1}\left(1+\frac{t}{z}\right)^{-\alpha}t^{\beta-1}e^tdt \quad \text{(d. 15)}$$

である.

式 (d. 14) の中で累乗されるとき，$-z$ と z は，偏角の絶対値が最小となるものをとらなければならない．最後に，被積分式の中で $(1+t/z)^{-\alpha}$ を t/z のベキに展開し，公式 (d. 7) を適用すると，結局 $G(\alpha, \beta, z)$ に対する漸近級数

$$G(\alpha, \beta, z)=1+\frac{\alpha\beta}{1!z}+\frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{2!z^2}+\cdots \tag{d. 16}$$

を得る．関数 $F(\alpha, \gamma, z)$ の漸近展開は式 (d. 14) および (d. 16) により与えられる．

γ が正の整数の場合には，方程式 (d. 2) の一般解 (d. 4) の第 2 項は第 1 項に等しいか ($\gamma=1$ のとき)，あるいはまったく意味を失ってしまうか ($\gamma>1$ のとき) のどちらかである．この場合には，二つの 1 次独立な解の組として式 (d. 14) の二つの項，すなわち積分 (d. 8) を径路 C_1 および C_2 に沿って行なったものを選ぶことができる (径路 C と同じく，これらの径路は必要条件を満足しており，したがってそれらの径路に沿った積分もまた方程式 (d. 2) の解である)．これらの解の漸近形はすでに得られている公式によって与えられる．残された問題は，その展開式を z の昇ベキの形に求めることである．そのためには，式 (d. 14) および関数 $z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma, z)$ に対する同様の式から出発する．これらの 2 式から，$G(\alpha, \alpha-\gamma+1, -z)$ を $F(\alpha, \gamma, z)$ および $F(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma, z)$ を用いてあらわし，しかる後 $\gamma=p+\varepsilon$ と置き (p は正の整数)，つぎに不定性 (の分子と分母，訳者) をロピタル (L'Hospital) の規則どうりに展開してから $\varepsilon\to 0$ の極限へ移行する．相当に長い計算の結果，次の展開式を得る：

$$\begin{aligned} G(\alpha, \alpha-p+1, -z)=-\frac{\sin\pi\alpha\cdot\Gamma(p-\alpha)}{\pi\Gamma(p)}z^{\alpha}\Big\{&\ln z\cdot F(\alpha, p, z) \\ &+\sum_{s=0}^{\infty}\frac{\Gamma(p)\Gamma(\alpha+s)[\psi(\alpha+s)-\psi(p+s)-\psi(s+1)]}{\Gamma(\alpha)\Gamma(s+p)\Gamma(s+1)}z^{s} \\ &+\sum_{s=1}^{p-1}(-1)^{s+1}\frac{\Gamma(s)\Gamma(\alpha-s)\Gamma(p)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(p-s)}z^{-s}\Big\}. \end{aligned} \tag{d. 17}$$

ここで ψ はガンマ関数の対数微分 $\psi(\alpha)=\Gamma'(\alpha)/\Gamma(\alpha)$ をあらわしている．

§ e. 超幾何関数

超幾何関数は $|z|<1$ なる円の内部では級数

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=1+\frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!}+\cdots \tag{e. 1}$$

によって定義され，$|z|>1$ ではこの級数の解析接続によって得られる（(e.6) 参照）．超幾何関数は微分方程式

$$z(1-z)u''+[\gamma-(\alpha+\beta+1)z]u'-\alpha\beta u=0 \qquad \text{(e. 2)}$$

の特解の一つである．パラメーター α および β は任意であるが，$\gamma \neq 0, -1, -2, \cdots$ である．明らかに関数 $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ はパラメーター α および β に関して対称である[1]．

方程式（e.2）の第 2 の独立な解は

$$z^{1-\gamma}F(\beta-\gamma+1, \alpha-\gamma+1, 2-\gamma, z)$$

である．これは $z=0$ に特異点をもつ．

ここで参照用として，超幾何関数が満たすいくつかの関係式を導いておこう．

関数 $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ は，もしも $\mathrm{Re}(\gamma-\alpha)>0$ ならば，すべての z に対して次の積分の形にあらわすことができる：

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=-\frac{1}{2\pi i}\frac{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}\int_{C'}(-t)^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}(1-tz)^{-\beta}dt. \qquad \text{(e. 3)}$$

ただし積分は d-2 図に示す径路 C' に沿って行なうものとする．この積分が実際に方程式（e.2）を満足することは，直接に代入して容易に確かめることができる．ここで定数因子は $z=0$ で 1 を得るように選ばれている．

方程式（e.2）に

$$u=(1-z)^{\gamma-\alpha-\beta}u_1$$

なる置換を行なうと，パラメーター α, β, γ のかわりにそれぞれ $\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma$ の入った同形の方程式が導かれる．これから次の等式が成り立つ：

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=(1-z)^{\gamma-\alpha-\beta}F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma, z) \qquad \text{(e. 4)}$$

（この等式の両辺は同一の方程式を満足し，$z=0$ における値が等しい）．

積分（e.3）に $t \to t/(1-z+zt)$ のような置換を行なうと，変数が z および

1）合流型超幾何関数は，$F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ から $\beta \to 0$ なる極限移行 $F(\alpha, \gamma, z)=\lim_{\beta\to\infty} F\left((\alpha, \beta, \gamma, \frac{z}{\beta}\right)$ により得られる．

文献によっては超幾何関数に対して記号 ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, z)$ が，また合流型超幾何関数に対しては ${}_1F_1(\alpha, \beta, z)$ が使われることもある．文字 F の左と右にある添字は，それぞれ，級数の各項の分子と分母にあるパラメーターの数をあらわしている．

$z/(z-1)$ である超幾何関数の間の次のような関係式が導かれる：

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=(1-z)^{-\alpha}F\left(\alpha, \gamma-\beta, \gamma, \frac{z}{z-1}\right). \tag{e.5}$$

この式の中の多価表式 $(1-z)^{-\alpha}$（および以下に出てくるすべての公式の中の類似の式）の値は，累乗されるとき複素量は偏角の絶対値が最小のものをとる，という条件から決められる．

次に証明なしに，変数が z および $1/z$ の超幾何関数を結びつける重要な公式を示そう：

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}(-z)^{-\alpha}F\left(\alpha, \alpha+1-\gamma, \alpha+1-\beta, \frac{1}{z}\right)$$
$$+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}(-z)^{-\beta}F\left(\beta, \beta+1-\gamma, \beta+1-\alpha, \frac{1}{z}\right). \tag{e.6}$$

この式は $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ を $|z|>1$ で収束する級数の形にあらわしており，それはもとの級数（e. 1）の解析接続になっている．

公式

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}F(\alpha, \beta, \alpha+\beta+1-\gamma, 1-z)$$
$$+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}(1-z)^{\gamma-\alpha-\beta}F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma+1-\alpha-\beta, 1-z) \tag{e.7}$$

は変数が z および $1-z$ の超幾何関数を結びつけている．公式（e. 5），（e. 6），（e. 7）を結合すると，次の関係式を得る：

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}(1-z)^{-\alpha}F\left(\alpha, \gamma-\beta, \alpha+1-\beta, \frac{1}{1-z}\right)$$
$$+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}(1-z)^{-\beta}F\left(\beta, \gamma-\alpha, \beta+1-\alpha, \frac{1}{1-z}\right), \tag{e.8}$$

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z)=\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}$$
$$\times z^{-\alpha}F\left(\alpha, \alpha+1-\gamma, \alpha+\beta+1-\gamma, \frac{z-1}{z}\right)+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}$$
$$\times(1-z)^{\gamma-\alpha-\beta}z^{\beta-\gamma}F\left(1-\beta, \gamma-\beta, \gamma+1-\alpha-\beta, \frac{z-1}{z}\right). \tag{e.9}$$

公式（e. 6）-（e. 9）の右辺の和の各項は，それぞれ超幾何方程式の解になっている．

もしも α（または β）が負の整数（またはゼロ），すなわち $\alpha=-n$ であるとすると，超幾何関数は n 次の多項式に帰着されて，次の形にあらわすことができる：

$$F(-n,\beta,\gamma,z)=\frac{z^{1-\gamma}(1-z)^{\gamma+n-\beta}}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}\frac{d^n}{dz^n}[z^{\gamma+n-1}(1-z)^{\beta-\gamma}]. \quad \text{(e. 10)}$$

この多項式は次式で定義される**ヤコビの多項式**と定数因子を除いて一致している：

$$P_n^{(a,b)}(z)=\frac{(a+1)(a+2)\cdots(a+n)}{n!}F\left(-n,a+b+n+1,a+1,\frac{1-z}{2}\right)$$

$$=\frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-z)^{-a}(1+z)^{-b}\frac{d^n}{dz^n}[(1-z)^{a+n}(1+z)^{b+n}]. \quad \text{(e. 11)}$$

$a=b=0$ のとき，ヤコビの多項式はルジャンドル多項式と一致する．$n=0$ のとき $P_0^{(a,b)}=1$ である．

§ f.　合流型超幾何関数を含む積分の計算

次の形の積分

$$J_{\alpha\gamma}^{\nu}=\int_0^\infty e^{-\lambda\nu}z^\nu F(\alpha,\gamma,kz)dz \quad \text{(f. 1)}$$

を考察しよう．これは収束すると仮定しよう．そのためには $\mathrm{Re}\,\nu>-1$ および $\mathrm{Re}\,\lambda>|\mathrm{Re}\,k|$ でなければならない．もしも α が負の整数であれば，第2の条件のかわりに $\mathrm{Re}\,\lambda>0$ を要求すれば十分である．

$F(\alpha,\gamma,kz)$ に対して積分表式（d. 9）を用い．径路積分よりまえに z に関する積分を行なえば，次式が得られる：

$$J_{\alpha\gamma}^{\nu}=-\frac{1}{2\pi i}\frac{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}\lambda^{-\nu-1}\Gamma(\nu+1)$$

$$\times\oint_{C'}(-t)^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}\left(1-\frac{k}{\lambda}t\right)^{-\nu-1}dt.$$

（e. 3）を考慮すれば，結局

$$J_{\alpha\gamma}^{\nu}=\Gamma(\nu+1)\lambda^{-\nu-1}F\left(\alpha,\nu+1,\gamma,\frac{k}{\lambda}\right) \quad \text{(f. 2)}$$

を得る．関数 $F(\alpha,\nu+1,\gamma,k/\lambda)$ が多項式に帰着される場合には，それに応じて積分 $J_{\alpha\gamma}^{\nu}$ も初等関数による表式で与えられる：

$$J_{\alpha\gamma}^{\gamma+n-1}=(-1)^n\Gamma(\gamma)\frac{d^n}{d\lambda^n}[\lambda^{\alpha-\gamma}(\lambda-k)^{-\alpha}], \tag{f. 3}$$

$$J_{-n\gamma}^{\nu}=(-1)^n\frac{\Gamma(\nu+1)(\lambda-k)^{\gamma+n-\nu-1}}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}\frac{d^n}{d\lambda^n}[\lambda^{-\nu-1}(\lambda-k)^{\nu-\gamma+1}], \tag{f. 4}$$

$$J_{\alpha m}^{n}=\frac{(-1)^{m-n}}{k^{m-1}(1-\alpha)(2-\alpha)\cdots(m-1-\alpha)}\Big\{-(m-1)!\frac{d^n}{d\lambda^n}[\lambda^{\alpha-1}(\lambda-k)^{m-\alpha-1}]$$

$$+n!(m-n-1)\cdots(m-1)\lambda^{\alpha-n-1}(\lambda-k)^{-1+m-n-\alpha}$$

$$\times\frac{d^{m-n-2}}{d\lambda^{m-n-2}}[\lambda^{m-\alpha-1}(\lambda-k)^{\alpha-1}]\Big\} \tag{f. 5}$$

(ここで m, n は整数で，$0\leqq n\leqq m-2$ をみたしている).

つぎに積分

$$J_\nu=\int_0^\infty e^{-kz}z^{\nu-1}[F(-n,\gamma,kz)]^2dz \tag{f. 6}$$

を計算しよう（n は正の整数で，$\mathrm{Re}\,\nu>0$). この計算のためには，被積分式の中に e^{-kz} のかわりに $e^{-\lambda z}$ を含むより一般的な積分から始めよう．関数 $F(-n, \gamma, kz)$ の一つを積分 (d. 9) の形に書き，そのあとで公式 (f. 3) を用いて z に関する積分を行なうと，次式を得る：

$$\int_0^\infty e^{-\lambda z}z^{\nu-1}[F(-n,\gamma,kz)]^2dz=-\frac{1}{2\pi i}(-1)^n\frac{\Gamma(1+n)\Gamma^2(\gamma)\Gamma(\nu)}{\Gamma^2(\gamma+n)}$$

$$\times\oint_{C'}(\lambda-kt-k)^{\gamma+n-\nu}(-t)^{-n-1}(1-t)^{\gamma+n-1}\frac{d^n}{d\lambda^n}[(\lambda-kt)^{-\nu}(\lambda-kt-k)^{\nu-\gamma}]dt.$$

λ に関する n 階の導関数は，明らかに t に関する同階の導関数を用いてあらわして置きかえることができる．これを行ない $\lambda=k$ と置こう．こうして積分 J_ν へ戻ると次のようになる：

$$J_\nu=-\frac{1}{2\pi i}\frac{\Gamma(n+1)\Gamma(\nu)\Gamma^2(\gamma)}{\Gamma^2(\gamma+n)k^\nu}$$

$$\times\oint_{C'}(-t)^{\gamma-\nu-1}(1-t)^{\gamma+n-1}\frac{d^n}{dt^n}[(1-t)^{-\nu}(-t)^{\nu-\gamma}]dt.$$

n 回部分積分を行なって，演算子 d^n/dt^n を $(-t)^{\gamma-\nu-1}(1-t)^{\gamma+n-1}$ のまえに移し，この導関数をライプニッツの公式に従って展開する．その結果積分の和が得られ，その各項はよく知られたオイラーの積分になる．結局求めている積分として次式を得る：

$$J_\nu=\frac{\Gamma(\nu)n!}{k^\nu\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}\times$$

$$\times\left\{1+\sum_{s=0}^{n-1}\frac{n(n-1)\cdots(n-s)(\gamma-\nu-s-1)(\gamma-\nu-s)\cdots(\gamma-\nu+s)}{[(s+1)!]^2\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+s)}\right\}. \quad \text{(f. 7)}$$

容易にわかるように，積分 J_ν の間には次の関係式が成り立つ（p は整数）：

$$J_{\gamma+p}=\frac{(\gamma-p-1)(\gamma-p)\cdots(\gamma+p-1)}{k^{2p+1}}J_{\gamma-1-p}. \quad \text{(f. 8)}$$

同様にすれば積分

$$J=\int_0^\infty e^{-\lambda z}z^{\gamma-1}F(\alpha,\gamma,kz)F(\alpha',\gamma,k'z)dz \quad \text{(f. 9)}$$

も計算される．関数 $F(\alpha',\gamma,k'z)$ を積分（d. 9）の形にあらわし，公式（f. 3）（で $n=0$ と置いたもの）を用いて z に関する積分を行なうと，次式を得る：

$$J=-\frac{1}{2\pi i}\frac{\Gamma(1-\alpha')\Gamma^2(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha')}\oint_{C'}(-t)^{\alpha'-1}(1-t)^{\gamma-\alpha'-1}(\lambda-k't)^{\alpha-\gamma}$$
$$\times(\lambda-k't-k)^{-\alpha}dt.$$

置換 $t\to\lambda t/(k't+\lambda-k')$ によりこの積分は（e. 3）の形になり，結局次式を与える：

$$J=\Gamma(\gamma)\lambda^{\alpha+\alpha'-\gamma}(\lambda-k)^{-\alpha}(\lambda-k')^{-\alpha'}F\left(\alpha,\alpha',\gamma,\frac{kk'}{(\lambda-k)(\lambda-k')}\right). \quad \text{(f. 10)}$$

もしも α（あるいは α'）が負の整数，すなわち $\alpha=-n$ であるならば，関係式（e. 7）を用いて，この式は次の形に書きかえることができる：

$$J=\frac{\Gamma^2(\gamma)\Gamma(\gamma+n-\alpha')}{\Gamma(\gamma+n)\Gamma(\gamma-\alpha')}\lambda^{-n+\alpha'-\gamma}(\lambda-k)^n(\lambda-k')^{-\alpha'}$$
$$\times F\left(-n,\alpha',-n+\alpha'+1-\gamma,\ \frac{\lambda(\lambda-k-k')}{(\lambda-k)(\lambda-k')}\right). \quad \text{(f. 11)}$$

最後に次の形の積分を考察しよう：

$$J_\gamma^{sp}(\alpha,\alpha')=\int_0^\infty e^{-\frac{k+k'}{2}z}z^{\gamma-1+s}F(\alpha,\gamma,kz)F(\alpha',\gamma-p,k'z)dz. \quad \text{(f. 12)}$$

パラメーターの値は，積分が絶対収束するようになっているものと仮定する．s,p は正の整数である．これらの積分のうちで一番かんたんな $J_\gamma^{00}(\alpha,\alpha')$ は，（f. 10）により

$$J_\gamma^{00}(\alpha,\alpha')=2^\gamma\Gamma(\gamma)(k+k')^{\alpha+\alpha'-\gamma}(k'-k)^{-\alpha}(k-k')^{-\alpha'}F\left(\alpha,\alpha',\gamma,-\frac{4kk'}{(k'-k)^2}\right) \quad \text{(f. 13)}$$

となる．しかしもしも α（あるいは α'）が負の整数，すなわち $\alpha=-n$ であるとすると，（f. 11）により，次のように書くことができる：

$$J_\gamma^{00}(-n,\alpha')=2^\gamma\frac{\Gamma(\gamma)(\gamma-\alpha')(\gamma-\alpha'+1)\cdots(\gamma-\alpha'+n-1)}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}$$

$$\times(-1)^n(k+k')^{-n+\alpha'-\gamma}(k-k')^{n-\alpha'}F\left[-n,\alpha',\alpha'+1-n-\gamma,\left(\frac{k+k'}{k-k'}\right)^2\right]. \tag{f. 14}$$

$J_\gamma^{sp}(\alpha,\alpha')$ をあらわす一般公式を導くこともできるが，それは複雑すぎて用いるのには便利でない．それよりも積分 $J_\gamma^{sp}(\alpha,\alpha')$ を $s=p=0$ なる積分に還元することのできる再帰公式を用いる方が便利である．公式

$$J_\gamma^{sp}(\alpha,\alpha')=\frac{\gamma-1}{k}\{J_{\gamma-1}^{s,p-1}(\alpha,\alpha')-J_{\gamma-1}^{s,p-1}(\alpha-1,\alpha')\} \tag{f. 15}$$

によって，$J_\gamma^{sp}(\alpha,\alpha')$ を $p=0$ の積分に還元することができる．そうすれば公式

$$J_\gamma^{s+1,0}(\alpha,\alpha')=\frac{4}{k^2-k'^2}\left\{\left[\frac{\gamma}{2}(k-k')-k\alpha+k'\alpha'-k's\right]J_\gamma^{s0}(\alpha,\alpha')\right.$$

$$\left.+s(\gamma-1+s-2\alpha')J_\gamma^{s-1,0}(\alpha,\alpha')+2\alpha' sJ_\gamma^{s-1,0}(\alpha,\alpha'+1)\right\} \tag{f. 16}$$

によって，最終的には $s=p=0$ なる積分に還元することができる[1]．

1) W. Gordon, Annalen der Physik [5] 2, 1031 (1929) 参照.

人名総索引

(配列は五十音順. ①, ②は第1巻, 第2巻を表す)

ラ　行

ワ　行

事項総索引

配列は電話帳順．①,②は第1巻，
第2巻を表す．太字の数字は主要
ページを示す．

ア　行

カ　行

サ 行

タ　行

ナ　行

ハ　行

マ　　行

ヤ 行

ラ 行

訳者あとがき

本書は，Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц《Квантовая Механика——нерелятивистская Теория》издание третье, переработанное и дополненное при участии Л. П. Питаевского, издательство《Наука》, Москва, 1974（ランダウ－リフシッツ著，ピタエフスキー協力《量子力学——非相対論的理論》第３改訂増補版，ナウカ出版社，モスクワ，1974）の前半の第１～10章，および数学的補遺の日本語訳である．後半第11～18章も，訳者を一人交代して近く出版の予定である．

原著は，1979年に《物理的運動学》をもって完結した《理論物理学教程》10巻のうちの第３巻に当たっている．

ランダウが悲劇的な自動車事故に遭った３箇月後の1962年４月，ランダウとリフシッツは《理論物理学教程》の著作に対し，レーニン賞を授与されている．続いてその年の11月には，スウェーデン王立アカデミーは，“自己の怠慢を歴史に残さないために”，ランダウへのノーベル賞の授与を決定している．《凝縮系とくに液体ヘリウムの理論に関する先駆的な理論的研究》に対してである．彼を死なせまいとする全世界の著名な物理学者の協力と国際医師団の活動によって，ランダウは死の淵から奇跡的に蘇ったのであったが，その後の回復はあまりかんばしくなく，ノーベル賞も科学アカデミー病院で，スウェーデン大使から受けとっている．その後小康を得た時期もあったが，1968年３月24日，容態は突然悪化し，４月１日，ジュリアン・ソレルを愛した天才は，その輝かしい生涯を悲劇をもって閉じたのである．

ランダウは，自分の考えを紙に書きつけるのが大の苦手であった．長年，論文はみな他人が代筆していたという．そのようなランダウを助けて《理論物理学教程》を実質的にすべてを書き通し，ランダウの死後も書き続けて，最初の計画通り全巻を完成させたのが共著者のエフゲニイ・ミハイロヴィチ・リフシ

ッツである．

リフシッツ教授は1915年の生れで，ランダウがハリコフ機械工業大学に在職中の直弟子の一人である．1933年から38年まで，ウクライナ共和国科学アカデミー物理・工学研究所（ハリコフ）で研究に従事し，39年からはカピッツァの創設したソビエト連邦科学アカデミー物理問題研究所に所属し，ランダウ・スクールの一員として輝かしい研究業績をあげ今日に至っている．1979年からは科学アカデミー正会員であり，また1982年からは英国学士院外国会員でもある．研究の分野は多岐に亘っているが，第2種相転移の理論（リフシッツの条件），強磁性体の磁区構造，強磁性共鳴(ランダウ-リフシッツの方程式)，物体間のファン・デル・ワールス力，相対論的宇宙論（膨張宇宙の安定性，重力方程式の解の特異性の問題）の理論的研究がとくに有名である．ファン・デル・ワールス力の研究に対しては，1954年に科学アカデミーのロモノーソフ賞が与えられている．

また，改訂作業に協力したレフ・ペトロヴィチ・ピタエフスキーは，1955年にサラトフ大学を卒業後，物理問題研究所に入り，現在はモスクワ物理・工学研究所教授である．また1976年からは科学アカデミー準会員である．彼は物理問題研究所の三若獅子の中に入れられたことのある気鋭の理論家である（レフ・П. ゴリコフと“若い”レフ・Д. ランダウ自身をあわせて，3レフ（ライオンの意）となる！）．研究分野は，プラズマ物理学，金属理論，低温物理学，超流動現象などに及んでいる．

原著第3版が1974年に出版されてから，すでに10年近い歳月が流れているが，その間，訳者達はそれぞれ研究や教育に忙しく，気になりながらも改訳をする余裕などなかった．このたび本書が何とか上梓の運びとなったのは，ひとえに東京図書編集部の松本重彰氏およびスタッフの方々の熱意によるところが大きい．まずここに感謝の意を表明したいと思う．

旧版と比べて見ると，原著第3版には至るところに細かく加筆されたり，削除されたりした跡があり，新たに稿を起したところもかなりの量に及んでいるため，新しく翻訳するのとほとんど同じくらいのエネルギーが必要であった．翻訳に当っては，物理的内容を誤りなく伝えることは勿論であるが，日本語として自然で一読してすぐ頭に入るような文体にしようと努力した．また読者の

理解を助けるために，訳者の注解をページの欄外に設け，*)…（訳注）の形で示した．訳者の短かい付加は，適宜，本文中に（…，訳者）の形で挿入した．

リフシッツ教授からは，旧版と同様新版に対しても，訳者に対する激励のことばをいただき，また前後三回に亘って新しい正誤表が送られてきた．これから推測すると，まえがきにも触れられているのだが，原著，訳書をあわせた《理論物理学教程》は，世界中に非常に広く厚い読者層をもち，そこから誤植の指摘を含めて，質問，意見，要望などが，たえずリフシッツのもとへ寄せられていると思われる．これらはすべて本書の中に反映させて戴いた．いまや世界の物理学徒の共通の財産となった《教程》は，ランダウ亡き後も，このようにたえず update され，時代の意見を反映して時々変身を遂げては，生き続けて行くのではなかろうか．拙訳が，もしも日本の物理学を学ぶ人々に，原著のもつ物理的内容の深さと豊富さを伝える一助になれば，われわれの喜びはまた格別である．

1983年6月　　　　　　訳　者

追　記

第3刷の刊行に際して，第1刷後に発見された誤植の訂正と原著の誤りの訂正を行なうと共に，訳文のより一層の正確さを期して，訳文の若干の改良と補足，また読者の理解の一助として，訳注の追加を行なった．

1984年4月，訳者達は，リフシッツ教授が訪日された折，御講演を拝聴する機会があった．また親しくお会いして，本教程の出版に関する打合せを行なうことができた．そのときの教授のご指摘に従って，当初の訳者あとがきに訂正と補足を行なった．

1984年11月　　　　　　訳　者

訳者紹介

佐々木 健　1955年　東京大学理学部物理学科卒業
同大学院数物系を経て
現　在　日本原子力研究所勤務
固体物性理論専攻

好村滋洋　1957年　東京大学理学部物理学科卒業
日本原子力研究所研究員
現　在　広島大学総合科学部教授
物性物理学，中性子回折専攻
理学博士

ランダウ＝リフシッツ理論物理学教程
量子力学〔改訂新版〕1

1983年7月15日　第1刷発行
1991年1月31日　第8刷発行

Printed in Japan

検印省略

著者　エリ・ランダウ
　　　イェ・リフシッツ
訳者　佐々木　健
　　　好村滋洋
発行所　東京図書株式会社
〒112 東京都文京区水道2—5—22
振替東京4-13803電話03(3814)7818〜9

ISBN 4-489-00058-8